

Frankfurt 1967

W. Scheid

1967



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41545305_0017

THEORIE DER PROJEKTION SPURIOSER
SCHWERPUNKTS- UND ROTATIONSZUSTÄNDE
AUS VIELTEILCHEN - WELLENFUNKTIONEN

Inaugural - Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der
Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Johann - Wolfgang - Goethe - Universität
zu
Frankfurt am Main

Vorgelegt von
W e r n e r S c h e i d
aus
Offenbach/Main

August 1967

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen Fakultät

Dekan:	Prof.Dr. W.Martienssen
Leiter der Arbeit:	Prof.Dr.W.Greiner
Erstgutachter:	Prof.Dr.W.Greiner
Zweitgutachter:	Prof.Dr.E.Schopper

Tag der mündlichen Prüfung: 7. Oktober 1967

Inhaltsverzeichnis

Abstract	1
Einführung	2
I. Die Projektion spurioser Schwerpunktszustände	5
1.1 Das Prinzip der Projektion	5
1.2 Die Projektion bei Einteilchen-Potentialen	8
1.3 Ergebnisse	10
II. Ein halbmikroskopisches Modell für deformierte Kerne	13
2.1 Ableitung aus dem Rotations-Vibrations-Modell	13
2.2 Die Wellenfunktion	21
2.3 Die kinetische Energie	23
2.4 Die Abhängigkeit der körperfesten Impulse	29
III. Die Projektion spurioser Rotationszustände	37
3.1 Die allgemeine Methode	38
3.2 Ein praktisches Verfahren	43
3.3 Das Nilssonmodell im Hilfssystem	55
IV. Ergebnis und Ausblick	61
Zusammenfassung	63
Anhänge	66
Literaturverzeichnis	79

ABSTRACT

A method is presented to project out spurious states from many particle wave functions. It is shown that the centre of mass motion can be separated for arbitrary single particle potentials. In addition this procedure is employed to eliminate spurious rotational states which are contained in the intrinsic nuclear motion of a semi-microscopic model.

Einführung

Die Arbeit befaßt sich mit der Projektion spurioser Zustände aus Vielteilchen - Wellenfunktionen.

Die Schwerpunktsbewegung wird für beliebige Einteilchen-Potentiale absepariert. Nach dem gleichen Verfahren eliminieren wir in einem halbmikroskopischen Modell für deformierte Kerne spuriose Rotations-Zustände, die in der intrinsischen Nukleonenbewegung enthalten sind.

Problemstellung

Die Fragestellung zu dieser Arbeit ergab sich im Rahmen einer Untersuchung, die Nieder-Energie-Spektren leichter deformierter Kerne mit einem halbmikroskopischen Modell zu erklären.

Das Kernmodell ist seiner Struktur nach aus dem phänomenologischen Rotations-Vibrations-Modell ^{1,2} abgeleitet. Es beschreibt die Zustände, auf denen sich die Rotationsbanden aufbauen, als Anregungen einzelner Nukleonen in einem deformierten Potential; wir bezeichnen diese Zustände als Anregungen des körperfesten oder intrinsischen Systems. Die Lage des intrinsischen Systems im Raum wird im kollektiven Bild durch Rotationskoordinaten gegeben. Da für die Rotationen anzunehmen ist, daß sie aus einer stark korrelierten Bewegung vieler Nukleonen entstehen, ist es zweckmäßig, sie im Kollektiv-Bild zu belassen.

Das Kernmodell enthält neben den Eulerschen Winkeln für die Rotation die Koordinaten sämtlicher Nukleonen im intrinsischen System. Die Koordinaten sind nicht voneinander unabhängig; andernfalls hätte der Kern zu viele Freiheitsgrade. Wir verlangen daher für die körperfesten Koordinaten die gleiche Nebenbedingung wie im Rotations-Vibrations-Modell: Im körperfesten System soll der Trägheitstensor auf Hauptachsen transformiert sein.

Es erhebt sich die Frage, wie sich diese Randbedingung auf die Bewegung der Nukleonen im intrinsischen System auswirkt.

Die direkte Methode, zusätzlich zu den Eulerschen Winkeln unabhängige Koordinaten im intrinsischen System einzuführen, ist für Kerne mit $A > 4$ praktisch nicht zu verwirklichen; denn die intrinsischen Koordinaten hängen unsymmetrisch und nichtlinear von den Nukleonenkoordinaten ab, und es bereitet einen zu großen Aufwand, explizit mit ihnen zu rechnen. Alle Vielteilchentheorien behandeln daher neben den Kollektiv-Koordinaten die Teilchenkoordinaten als unabhängig. Wir unterscheiden in der Literatur zwei grundsätzlich verschiedene Wege: Im Verfahren der kontinuierlichen Variations-Parameter von Hill und Wheeler³ faßt man die Kollektiv-Koordinaten als Parameter in der Vielteilchen-Wellenfunktion auf und variiert nach ihnen die Energie.

Die zweite Methode ist das Verfahren der redundanten Variablen, das Lipkin und andere Autoren⁴ entwickelt haben: es besteht darin, überflüssige Koordinaten im Laborsystem anzusetzen, um das Teilchen-System nach einer kanonischen Transformation außer mit allen Teilchenkoordinaten auch konsistent mit Kollektiv-Koordinaten zu beschreiben. Der Einfluß der redundanten Variablen auf die Wellenfunktionen läßt sich nur näherungsweise eliminieren.

In dieser Arbeit wird eine Methode vorgeschlagen, die sich von den beiden oben erwähnten unterscheidet und deren allgemeines Prinzip sich bereits bei Lipkin⁵ finden läßt. Wir suchen zuerst Lösungen für die intrinsische Hamiltonfunktion; sie entsteht aus der Hamiltonfunktion des Gesamtsystems, wenn wir die Rotationsenergien abziehen, und hängt von intrinsischen, nicht näher zu definierenden Koordinaten ab. Um die Lösungen zu finden, konstruieren wir im Laborsystem eine neue Hamiltonfunktion, die bei einer kanonischen Transformation

in zwei vertauschbare Anteile aufspaltet: Der erste Teil enthält nur intrinsische Koordinaten und ist die intrinsische Hamiltonfunktion. Der zweite Teil hängt einzig von den Rotationskoordinaten ab, in einer Weise, die beliebig sein darf und die wir optimal festlegen; er liefert ein diskretes Spektrum für die Rotation. Die neue Hamiltonfunktion hat die gleichen intrinsischen Zustände wie die alte; jedoch besteht der Unterschied, daß sich auf jedem intrinsischen Zustand ein ungestörtes, unphysikalisches Rotations-Spektrum aufbaut. Beschränken wir die Lösungen auf die Klasse, die den Rotationsanteil im nicht entarteten Grundzustand hat, so separiert die Wellenfunktion im transformierten System in ein Produkt aus intrinsischer und kollektiver Wellenfunktion. Wir gewinnen damit Wellenfunktionen für die intrinsischen Zustände im Laborsystem, deren spurioser Rotationsanteil bei allen Zuständen der gleiche ist. Daran anschließend berechnen wir die Rotationsenergie des Systems und ihre Kopplung mit der intrinsischen Bewegung. Hierauf nimmt die unphysikalische Rotation der intrinsischen Wellenfunktion keinen Einfluß.

Das Prinzip, die kollektive Bewegung in einer Vielteilchen - Wellenfunktion durch eine geeignet gewählte neue Hamiltonfunktion herauszuprojizieren, wird in Kapitel I an der Schwerpunktsbewegung in beliebigen Einteilchenpotentialen erläutert. In Kapitel II konstruieren wir ein Modell für deformierte Kerne und transformieren hierfür nach Villars⁶ die kinetische Energie eines Vielteilchen-Systems auf Rotations- und intrinsische Koordinaten. In Kapitel III wird schließlich die Methode dargelegt, spuriose Rotationszustände aus der intrinsischen Wellenfunktion zu separieren.

I Die Projektion spurioser Zustände der Schwerpunktsbewegung.

Bei der Berechnung von Spektren in leichten Kernen mit Vielteilchen-Wellenfunktion fragt man sich, wie der Einfluß der Schwerpunktsbewegung eliminiert werden kann. Verschiedene Autoren⁷ haben dieses Problem für den speziellen Fall gelöst, daß das Einteilchenpotential der harmonische Oszillator ist. Der harmonische Oszillator separiert als einziges bekanntes Einteilchenpotential in intrinsische und Schwerpunkts-Koordinaten.

1.1 Das Prinzip der Projektion.

Die inneren Zustände eines Vielteilchensystems hängen nicht von der Bewegung des Schwerpunkts ab. Wir sind daher frei, den Schwerpunktsanteil der Hamiltonfunktion so abzuändern, daß der Schwerpunkt eine definierte Bewegung ausführt.

Die Hamiltonfunktion eines Systems, zwischen dessen Teilchen Zwei-Körper-Kräfte wirken, ist translationsinvariant.

$$H = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i < k} V_{ik} \quad (1)$$

Wir transformieren die $3A$ Teilchenkoordinaten $\vec{r}_i$ auf Schwerpunktskoordinaten

$$\vec{R} = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \vec{r}_i \quad (2)$$

und $3A - 3$ nicht näher definierte innere Koordinaten ξ_j . Die Hamiltonfunktion spaltet in zwei vertauschbare Bestandteile auf, in die kinetische Energie des Schwerpunkts und in die Hamiltonfunktion für die innere Bewegung

$$H = \frac{p^2}{2AM} + H_{\text{int}}(\xi_j) \quad (3)$$

Die Lösungen von Hint bestimmen die Energieniveaus

$$H_{\text{int}}(\xi_j) \varphi_i(\xi_j) = \epsilon_i \varphi_i(\xi_j) \quad (4)$$

Der Schwerpunkt verhält sich wie ein freies Teilchen; seine Wellenfunktion kann z.B. als eine Überlagerung ebener Wellen dargestellt werden.

$$\phi(\vec{R}) = \int a(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{R}} d\tau_k \quad (5)$$

In der Regel sucht man Lösungen der Hamiltonfunktion H mit Vielteilchen-Wellenfunktionen, die als Funktion der Teilchen-Koordinaten $\vec{r}_i$ im Unendlichen verschwinden. Daher enthalten alle Wellenfunktionen ein Wellenpaket für die Schwerpunktsbewegung, das um den Koordinaten-Ursprung konzentriert ist. Die Struktur des Wellenpakets sowie seine Energie können von Zustand zu Zustand stark variieren. Die berechneten Energie-Niveaus stimmen dann nicht mit denen der intrinsischen Hamiltonfunktion überein.

Ohne die intrinsischen Eigenschaften der Hamiltonfunktion H zu verändern, können wir eine neue Hamiltonfunktion H' einführen, die für den Schwerpunkt statt der Kontinuums-Zustände ein diskretes Spektrum liefert. Wir addieren zur Hamiltonfunktion ein Zusatzpotential, das den Schwerpunkt an den Koordinaten-Ursprung bindet.⁺)

$$H' = H + W(\vec{R}) \quad (6)$$

Das Potential ist physikalisch unrealistisch und dient nur dazu, die Schwerpunktsbewegung in der Wellenfunktion zu determinieren.

Die diskreten Zustände des Schwerpunkts in H' berechnen sich aus

$$\left(\frac{p^2}{2Am} + W(\vec{R}) \right) \phi_\alpha(\vec{R}) = \epsilon_\alpha \phi_\alpha(\vec{R}) \quad (7)$$

+) Während der Fertigstellung der Arbeit wurde eine ähnliche Idee von F. Palumbo in Nucl. Phys. A 99(1967)100 veröffentlicht. Palumbo gibt aber kein praktisches Verfahren zur Projektion an, wie wir in einer späteren Veröffentlichung zeigen werden.

In den Eigenwerten von H' sind die Niveaus des Schwerpunkts und der inneren Bewegung überlagert. Auf jeden inneren Zustand der Energie ϵ_i baut sich ungestört das Schwerpunkts-Spektrum auf.

$$E = \epsilon_i + S_0, \epsilon_i + S_1, \epsilon_i + S_2 \dots \quad (8)$$

Die Eigenlösungen von H'

$$(H(\vec{r}_i) + W(\frac{1}{A} \sum_i \vec{r}_i)) \psi_n(\vec{r}_i) = E_n \psi_n(\vec{r}_i) \quad (9)$$

lassen sich neben der inneren Anregung nach den Zuständen des Schwerpunkts klassifizieren, wenn sie gleichzeitig in der mit H' vertauschbaren Hamiltonfunktion des Schwerpunkts diagonal sind:

$$(-\frac{\hbar^2}{2AM} (\sum_i \vec{\nabla}_i)^2 + W(\frac{1}{A} \sum_i \vec{r}_i)) \psi_n(\vec{r}_i) = S_\alpha \psi_n(\vec{r}_i) \quad (10)$$

Jede Klasse von Wellenfunktionen, die den Schwerpunkt in einem festen Zustand enthält, umfaßt das volle Spektrum der inneren Zustände. Wir zählen daher keine spuriösen Zustände mit, d.h. Zustände mit gleicher innerer Anregung, aber verschiedener Schwerpunktsbewegung, wenn wir uns auf die Klasse von Wellenfunktionen beschränken, die den Schwerpunkt im Grundzustand beläßt. Da der Grundzustand nicht energie-entartet ist, separiert die Wellenfunktion in den transformierten Koordinaten:

$$\psi_i(\vec{r}_i) = \phi_0(\vec{R}) \cdot \varphi_i(\xi_j) \quad (11)$$

Wir erreichen also nach zweimaligem Diagonalisieren, nämlich von (9) und (10), daß der Schwerpunkt in allen Wellenfunktionen den gleichen Zustand einnimmt, ohne auf Schwerpunkts- und innere Koordinaten transformieren zu müssen.

Die durch $W(\vec{R})$ willkürlich vorgegebene Schwingung des Schwerpunkts wirkt sich nicht auf Matrixelemente von Operatoren aus, die Übergänge im intrinsischen System veranlassen. Da solche Operatoren nur von inneren Koordinaten abhängen, müssen wir sie im Laborsystem auf den

Schwerpunkt beziehen:

$$\begin{aligned}\vec{r}_i' &= \vec{r}_i - \vec{R} = \vec{r}_i - \frac{1}{A} \sum_i \vec{r}_i \\ \vec{p}_i' &= \vec{p}_i - \frac{1}{A} \vec{P} = \vec{p}_i - \frac{1}{A} \sum_i \vec{p}_i\end{aligned}\quad (12)$$

Die Matrixelemente von $\vec{R}$ sind in der Regel zu vernachlässigen, da die mittlere Grundzustandsamplitude in einem sinnvoll gewählten Potential $W(\vec{R})$ klein gegen die Kernabmessungen bleibt. Dies liegt an der großen Masse AM der Schwerpunktsbewegung.

1.2 Projektion bei beliebigen Einteilchen-Potentialen

Als Ausgangsbasis, um das Vielnukleonenproblem zu lösen, verwendet man Wellenfunktionen des Schalenmodells. Im Schalenmodell bewegen sich die Nukleonen unabhängig voneinander in einem mittleren Potential. Ein solches Potential resultiert aus Hartree-Fock-Rechnungen und ist nicht translationsinvariant.

Das Oszillatorpotential nimmt unter den Einteilchen-Potentialen eine Sonderstellung ein, da es die Schwerpunkts- und innere Bewegung nicht verkoppelt; es separiert nämlich in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$\sum_{i=1}^A r_i^2 = AR^2 + \frac{1}{A} \sum_{i < j}^A (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \quad (13)$$

In allen anderen bekannten Einteilchenpotentialen, z.B. im Saxon-Woods-Potential⁸, treten Terme auf, die Schwerpunkts- und innere Koordinaten vermischen. Um diese unphysikalische Kopplung zu eliminieren, zählen wir die Koordinaten in den Einteilchenpotentialen statt von einem fiktiven Ursprung vom Schwerpunkt aus; d.h. wir ändern das Potential wie folgt:

$$V(\vec{r}, \vec{p}) \Rightarrow V(\vec{r} - \vec{R}, \vec{p} - \frac{1}{A} \vec{P}) \quad (14)$$

Die neuen Potentiale sind nun translationsinvariant, sind aber keine Einteilchen-Potentiale mehr.

Zur Berechnung der inneren Energien nach der Methode des vorigen Abschnitts ist statt der Schalenmodell-Hamiltonfunktion

$$H = \sum_i T_i + V(\vec{r}_i, \vec{p}_i) \quad (15)$$

die neue Hamiltonfunktion H' zu lösen.

$$H' = \sum_i T_i + V(\vec{r}_i - \vec{R}, \vec{p}_i - \frac{1}{A}\vec{P}) + W(\vec{R}) \quad (16)$$

Als Basissystem, mit dem wir H' diagonalisieren, nehmen wir zweckmäßigerweise die Lösungen von H , die sich in Form von Slater-Determinanten schreiben. Da wir bei der Projektion der spuriosen Schwerpunktsbewegung mit einer möglichst kleinen Basis auskommen wollen, wählen wir das zunächst willkürliche Potential $W(\vec{R})$ optimal. Die Lösungen von H sind näherungsweise gleichzeitig Lösungen von H' , wenn $W(\vec{R})$ den folgenden Ausdruck minimalisiert:

$$\sum_i V(\vec{r}_i) - \sum_i V(\vec{r}_i - \vec{R}, \vec{p}_i - \frac{1}{A}\vec{P}) - W(\vec{R}) \quad (17)$$

Wird im Falle eines isotropen Oszillatorpotentials

$$V(r) = \frac{M\omega^2}{2} r^2 \quad (18)$$

für das Zusatzpotential die quadratische Form gewählt

$$W(R) = \frac{MA\omega^2}{2} R^2, \quad (19)$$

so verschwindet der obige Ausdruck identisch. Die beiden Hamiltonfunktionen H und H' gehen ineinander über.

Der grobe Verlauf aller Einteilchenpotentiale wird für gebundene Zustände durch ein äquivalentes Oszillator-

potential approximiert; wir setzen daher $W(\vec{R})$ der Einfachheit halber für alle isotropen Einteilchenpotentiale in der quadratischen Form (19) an. Wir müssen nur die Frequenz des äquivalenten Oszillators aufsuchen. Werden deformierte Einteilchenpotentiale wie im Nilssonmodell verwendet, so ändert sich $W(\vec{R})$ sinnentsprechend ab:

$$W(\vec{R}) = \frac{MA}{2} (\omega_x^2 R_x^2 + \omega_y^2 R_y^2 + \omega_z^2 R_z^2) \quad (20)$$

Um die Matrixelemente von V in H' näherungsweise zu berechnen, kann V in eine Taylorreihe nach R und P entwickelt werden, die rasch konvergiert. Da der Hauptbeitrag zur Schwerpunktsenergie von dem ortsabhängigen Anteil $V_0(\vec{r})$ des Potentials kommt, dürfen wir die Spin-Bahn-Kopplung und andere impulsabhängige Anteile als Korrektur zur Schwerpunktsbewegung ansehen und vernachlässigen. Somit schreibt sich H' :

$$H' = \sum_i T_i + V(\vec{r}_i, \vec{p}_i) + \frac{MA}{2} (\omega_x^2 R_x^2 + \omega_y^2 R_y^2 + \omega_z^2 R_z^2) - \sum_i (\vec{R} \cdot \vec{V}_i) V_0(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_i (\vec{R} \cdot \vec{V}_i)^2 V_0(\vec{r}_i), \quad (21)$$

Wobei R nachträglich mit (2) in Teilchenkoordinaten zu übersetzen ist.

Zusätzlich zu H' wird, wie im vorigen Abschnitt dargelegt, die Schwerpunktshamiltonfunktion mit dem gleichen $W(\vec{R})$ diagonalisiert.

1.3. Ergebnisse zur Projektion spurioser Schwerpunktszustände.

Der Schwerpunkt hat ein Oszillator-Spektrum bei der speziellen Wahl für $W(\vec{R})$ in (19). Die energetisch niedrigsten spuriosen Zustände sind daher die P-Zustände, die bei sphärischen g-g Kernen unter den 1^- -Zuständen liegen.

Sie werden im Teilchen-Loch-Bild als 1p-1h-Anregungen auf dem Grundzustand dargestellt. Da die Restwechselwirkung 2p-2h-Zustände stark absenkt, treten in der gleichen Energie-Region auch spuriose 2p-2h-Zustände auf; die in der Regel positive Parität haben.

Das Verfahren des vorigen Abschnitts wurde für den Kern Ne^{20} im Nilssonmodell⁹ mit einer Restwechselwirkung mit Gillettschen Parameter¹⁰ durchgeführt. Für den deformierten Nilsson-Oszillator nehmen wir einen Deformationsparameter $\delta = 0.4$, den wir aus der Lage des Minimums der Grundzustandsenergie bestimmen. Die beiden Frequenzen in der z- und x-y-Richtung haben damit den Wert $\hbar\omega_z = 11 \text{ MeV}$ und $\hbar\omega_{x,y} = 18 \text{ MeV}$.

Bevor die Schwerpunktshamiltonfunktion diagonalisiert wird, sind die spuriosen Schwerpunkts-Anregungen über eine Reihe von Zuständen verteilt. Die Energien solcher Zustände liegen durch die spuriosen Anteile bis zu etwa 4 MeV falsch. Nach der Diagonalisierung der Schwerpunktshamiltonfunktion können die Zustände eindeutig in spuriose und nicht spuriose unterteilt werden.

Wegen der großen Steifheit des Oszillators in x-y-Richtung kommen im Bereich $< 15 \text{ MeV}$ keine spuriosen Zustände vor, in denen der Schwerpunkt in x-y-Richtung angeregt ist. Anders verhält es sich mit der Schwerpunkts-Schwingung in z-Richtung: Unter den 2p-2h-Zuständen positiver Parität, die ungestört bei etwa 16 MeV liegen und die die Restwechselwirkung um etwa 8 MeV absenkt, sind einige tiefliegende spuriose Niveaus zu sehen; in ihnen ist ein Oszillatorquant $\hbar\omega_z$ des Schwerpunkts angeregt. Bei den Zuständen negativer Parität identifizieren wir in der Regel fast alle tiefsten Zustände als spuriose Anregungen des Schwerpunkts in z-Richtung.

Das Nilssonmodell enthält einen Spin-Bahn-Term und einen l^2 -Term. Wie die Rechnungen zeigen, darf ihr Einfluß auf die Schwerpunktsbewegung vernachlässigt werden. Ebenso stört die Restwechselwirkung nur wenig die in Abschnitt 1.2 beschriebene Methode. Die Restwechselwirkung ist in einer Teilchen-Loch-Rechnung mit deformierten Basisfunktionen nur näherungsweise translationsinvariant; sie korreliert zwar die Bewegung der Nukleonen, läßt aber die Schwerpunkts-Struktur der Wellenfunktion unverändert, die im wesentlichen einzig durch das mittlere Potential bestimmt ist. Beide Effekte zusammen, die drehimpulsabhängigen Terme des Nilssonmodells und die Restwechselwirkung, erzeugen spuriose Beiträge zur Schwerpunktsbewegung, die in Ne^{20} kleiner als 0.5 MeV ausfallen und wechselndes Vorzeichen haben; dieser Beitrag ist mit $\hbar\omega_z = 11$ MeV zu vergleichen.

II Ein halbmikroskopisches Modell für deformierte Kerne.

Die Spektren von Kernen zwischen den Schalenabschlüssen zeigen ausgeprägte Rotationsbanden, die sich ausreichend mit einem phänomenologischen Rotatormodell erklären lassen. Hartree-Fock-Rechnungen für solche Kerne ergeben, daß die Nukleonen eine deformierte Kerngestalt energetisch bevorzugen. Die räumliche Stellung des deformierten Systems wird auf natürliche Weise durch Eulersche Winkel beschrieben. Während die Schwerpunktskoordinaten eindeutig mit den Teilchenkoordinaten verknüpft sind, haben wir für die kollektiven Rotationskoordinaten verschiedene Möglichkeiten, ihren Zusammenhang mit den Teilchenkoordinaten zu definieren. Die Form einer Hamiltonfunktion, in der Eulersche Winkel als kollektive Koordinaten auftreten, hängt im wesentlichen davon ab, wie wir das intrinsische System in den Teilchenkoordinaten festlegen.

Um die Rotationskoordinaten dem physikalischen Problem angemessen zu definieren, übernehmen wir die Definition des intrinsischen Systems aus dem Rotations-Vibrations-Modell: In diesem Kernmodell verschwinden die Massen-deviationsmomente im intrinsischen System.

2.1 Phänomenologische Ableitung aus dem Rotations-Vibrationsmodell.

Das Rotations-Vibrationsmodell^{1,2} eignet sich vorzüglich zur Deutung der Nieder-Energie-Niveaus und Übergangswahrscheinlichkeiten in deformierten Kernen. Es beschränkt die Dynamik solcher Kerne auf zwei kollektive Bewegungstypen: Rotation der ellipsoidförmigen Kerngestalt und Quadrupol-Oberflächenschwingungen im körperfesten System. Die Vibration^{en}, die die Bandenköpfe der Rotationsniveaus

bilden, lassen sich als eine korrelierte Anregung weniger Nukleonen in einem deformierten Potential verstehen und beschreiben; die Vibrationsenergien liegen nämlich in der gleichen Größenordnung wie die Anregungsenergien. Hingegen fällt es schwer, auch die Rotationsbewegung mikroskopisch zu erklären, denn die niedrigen Rotationsenergien und großen Übergangswahrscheinlichkeiten innerhalb der Banden führen zu dem Schluß, daß in den Rotationen sehr viele Nukleonen korreliert sind. Die Rotationen werden daher am einfachsten kollektiv behandelt. Auf Grund dieser Überlegungen formulieren wir ein halbmikroskopisches Modell: Wir übersetzen im Rotations-Vibrationsmodell die Vibration in eine intrinsische Teilchenbewegung, behalten aber die Rotation als kollektive Anregung bei.

2.11 Überblick über das Rotations-Vibrations-Modell.

Im Rotations-Vibrations-Modell^{1,2} hängt die Kernoberfläche im intrinsischen System von zwei reellen Parametern ab, den Vibrationskoordinaten a_0 und a_2 :

$$R = R_0 (1 + a_0 Y_{20}(\vartheta, \varphi) + a_2 (Y_{22}(\vartheta, \varphi) + Y_{2-2}(\vartheta, \varphi))) \quad (22)$$

R ist die Gleichung einer ellipsoidförmigen Fläche, deren Hauptachsen mit den Koordinatenachsen des intrinsischen Systems zusammenfallen. Unter der Annahme konstanter Nukleondichte ρ_0 verschwinden daher im intrinsischen System die Deviationsmomente.

$$I_{xy} = I_{yz} = I_{zx} = 0 \quad (23)$$

$$\text{mit } I_{xy} = \int \rho_0 xy dV \quad \text{analog } I_{yz}, I_{zy} \quad (24)$$

Die Stellung des intrinsischen Systems im Labor wird durch Eulersche Winkel festgelegt. Da die Definition des intrinsischen Systems durch alle 24 Koordinatensysteme erfüllt wird, die durch Permutation der Achsen eines Systems hervorgehen, besitzt die Wellenfunktion Symmetrie-Eigenschaften gegenüber solchen Koordinaten-

transformationen.

Hat man im Laborsystem, wo die Oberfläche durch fünf Deformationsparameter bestimmt ist,

$$R_{\text{Lab}} = R_0 \left(1 + \sum_{\mu} \alpha_{\mu} Y_{2\mu}(\vartheta, \varphi) \right) \quad \text{mit} \quad \alpha_{\mu}^* = (-1)^{\mu} \alpha_{-\mu} \quad (25)$$

die kinetische Energie nach α_{μ} entwickelt,

$$T = \frac{B}{2} \sum_{\mu} |\dot{\alpha}_{\mu}|^2 \quad (26)$$

so führt eine Transformation auf das intrinsische System zu einem Ausdruck, der in Rotations- und Vibrationsenergie aufspaltet^{1,2}

$$\begin{aligned} T &= T_{\text{rot}} + T_{\text{vib}} \\ &= \sum_{K=1}^3 \frac{J_K^2}{2\Theta_K} + \frac{B}{2} (\dot{a}_0^2 + 2\dot{a}_2^2) \end{aligned} \quad (27)$$

J_K bezeichnet den Gesamtdrehimpuls bezogen auf die K-te intrinsische Achse, er hängt als Operator nur von Eulerschen Winkeln ab. Die Trägheitsmomente

$$\Theta_K = 4B\beta^2 \sin^2\left(\gamma - K\frac{2\pi}{3}\right), \quad K = 1, 2, 3 \quad (28)$$

mit β und γ aus

$$a_0 = \beta \cos \gamma, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma \quad (29)$$

heißen hydrodynamische Trägheitsmomente, wenn für den Massenparameter B der Wert des Tröpfchenmodells übernommen wird.

$$B = \frac{1}{2} M \rho_0 R_0^5, \quad \rho_0 = 3A/4\pi R_0^3 \quad (30)$$

Die hydrodynamischen Trägheitsmomente können in symmetrischer Weise als Funktionen der Trägheitsmomente des starren Körpers dargestellt werden (bis auf Glieder a_0^3, a_2^3).

$$\Theta_z = M \frac{(I_x - I_y)^2}{I_x + I_y} \quad \text{analog} \quad \Theta_x, \Theta_y \quad (31)$$

mit $I_{x,y,z}$ kürzen wir die folgenden Ausdrücke ab.

$$I_{x, \{I_y, I_z\}} = \int_{\mathcal{S}_0}^R x^2 \{y^2, z^2\} dV \quad (32)$$

Die Trägheitsmomente verschwinden um Achsen mit Rotationssymmetrie. Wir zeigen im Anhang A, daß die letzte Relation für Θ , Gl.(31), auch gilt, wenn die kinetische Energie bis Glieder in $\propto \mu^3$ entwickelt wird.

Zur kinetischen Energie fügt man ein Potential in den a_0 - und a_2 -Koordinaten hinzu, das die Oberfläche um die axialsymmetrische statische β_0 -Deformation schwingen läßt²:

$$V_{\text{vib}} = \frac{C_0}{2} (a_0 - \beta_0)^2 + C_2 a_2^2 \quad (33)$$

Damit hat die Hamiltonfunktion des Rotations-Vibrations-Modell die folgende Form:

$$H = T_{\text{rot}} + T_{\text{vib}} + V_{\text{vib}} \quad (34)$$

Rotationen und Vibrationen wechselwirken über die veränderlichen Trägheitsmomente. Im allgemeinen ist die Kopplung als klein zu betrachten, so daß die Wellenfunktion ohne Berücksichtigung ihrer Symmetrieeigenschaften in einen intrinsischen und einen Rotations-Anteil aufspaltet:

$$\psi = \varphi(a_0, a_2) \cdot D_{MK}^I(\mathcal{Q}_j) \quad (35)$$

2.12 Die Hamiltonfunktion des halbmikroskopischen Modells.

Die Energie des Nukleonensystems im halbmikroskopischen Modell baut sich aus zwei Anteilen auf: Aus der kinetischen Energie für die Rotation des deformierten Kerns und aus der Energie der Nukleonen in einem körperfesten System^{11,12}

$$H = T_{\text{rot}} + H_{\text{intr.}} \quad (36)$$

a) Die Rotationsenergie

Für die Rotationsenergie setzen wir an:

$$T_{\text{rot}} = \sum_{K=X,Y,Z} \frac{(J - \sum_{i=1}^A j_i)_K^2}{2 \Theta_K} \quad (37)$$

mit den hydrodynamischen Trägheitsmomenten

$$\Theta_Z = M \frac{(I_x - I_y)^2}{I_x + I_y} \quad \text{analog} \quad \Theta_x, \Theta_y \quad (38)$$

$$\text{und} \quad I_{X,Y,Z} = \sum_{i=1}^A x_i^2, y_i^2, z_i^2$$

T_{rot} ist aus dem entsprechenden Ausdruck des Rotations-Vibrations-Modells entstanden. Wir setzen hierzu die kollektiven Quadrupolmomente

$$Q_{2\mu} = \int_0^{R_0(1+\sum a_{\mu} Y_{2\mu})} r^2 Y_{2\mu} \rho_0 dV = \rho_0 R_0^5 a_{\mu}^* \quad (39)$$

denen im Teilchenbild gleich:

$$Q_{2\mu} = \sum_{i=1}^A r_i^2 Y_{2\mu}(\vartheta_i, \varphi_i) \quad (40)$$

und erhalten einen Zusammenhang zwischen kollektiven und Teilchen-Koordinaten^{11,12}:

$$a_{\mu} = \frac{4\pi}{3AR_0^2} \sum_{i=1}^A r_i^2 V_{2\mu}^*(\vartheta_i, \varphi_i) \quad (41)$$

bzw. $I_x = \sum_{i=1}^A X_i^2$ usw.

Im intrinsischen Koordinatensystem des Rotations-Vibrations-Modells sind die Bedingungen

$$a_1 = a_{-1} = \text{Im}(a_2) = 0 \text{ bzw. } I_{xy} = I_{yz} = I_{zx} = 0 \quad (42)$$

erfüllt; somit bestehen im Teilchenbild zwischen den Koordinaten die folgenden Relationen:

$$\sum_{i=1}^A X_i Y_i = \sum_{i=1}^A Y_i Z_i = \sum_{i=1}^A Z_i X_i = 0 \quad (43)$$

Die Teilchenkoordinaten hängen im intrinsischen System voneinander ab und dürfen nicht als unabhängig betrachtet werden. Die drei Freiheitsgrade, die dem inneren System gegenüber dem raumfesten System fehlen, sind die Rotations-Freiheitsgrade. Die Eulerschen Winkel sind durch das Verschwinden der Deviationsmomente implizit definiert.

Die Nukleonen haben im intrinsischen System den sogenannten inneren Drehimpuls $\sum j_i$; das deformierte körper-feste System dreht sich im Laborsystem mit einem Drehimpuls, den wir als Differenz zwischen Gesamtdrehimpuls und innerem Drehimpuls schreiben.

Die Trägheitsmomente, sowie innerer Drehimpuls hängen von allen Nukleonenkoordinaten ab, da nicht wie im "unified model"¹ zwischen äußeren Teilchen und dem core unterschieden wird. Im "unified model" bezeichnet der analoge Ausdruck zu Trot einzig die Rotationsenergie des Rumpfs. Der Drehimpuls des Rumpfs stellt sich dar als die Differenz zwischen dem Gesamtdrehimpuls und dem

Drehimpuls der äußeren Teilchen, der auf körperfeste Achsen projiziert wird und der nicht mit dem Drehimpuls der äußeren Teilchen im körperfesten System gleichzusetzen ist. Auch tragen zu den Trägheitsmomenten des "unified model" nur die Rumpfnukleonen bei. Verglichen damit repräsentiert unser Ansatz die Rotationsenergie, die aufgewendet wird, ein deformiertes Potential zu rotieren, an dessen Massenträgheit sämtliche Nukleonen Anteil haben.

b) Die intrinsische Energie

Als Hamiltonoperator für die intrinsische Bewegung setzen wir das Nilssonmodell⁹ mit Restwechselwirkung an.

$$H_{\text{intr}} = \sum_{i=1}^A \frac{p_i^2}{2M} + \frac{M\omega_0^2}{2} \left(\left(1 + \frac{2}{3}\delta\right)(x_i^2 + y_i^2) + \left(1 - \frac{4}{3}\delta\right)z_i^2 \right) + C e \cdot s_i + D e_i^2 + V_{\text{rest}} \quad (44)$$

Das Nilssonmodell gebraucht einen harmonischen anisotropen Oszillator als rechnerisch einfachsten Ansatz für ein deformiertes Hartree-Fock-Potential. Da die Kernmasse als inkompressibel vorausgesetzt werden darf, muß das Kernvolumen bei einer Deformation erhalten bleiben. Kernmasse und mittleres Potential verlaufen im Ortsraum approximativ in gleicher Weise. Wir nehmen daher an, daß sich der Volumeninhalt, den eine Äquipotentialfläche einschließt, nicht verändert, wenn der Kern deformiert wird.

$$\omega_x \omega_y \omega_z = \omega_0^3 \quad (45)$$

ω_0 ist die Oszillatorfrequenz bei verschwindender Deformation. Die mittlere Frequenz ω_0 hängt daher von der Deformation ab:

$$\hbar \omega_0 = \frac{\hbar \tilde{\omega}_0}{\left[\left(1 + \frac{2}{3}\delta\right)^2 \left(1 - \frac{4}{3}\delta\right) \right]^{1/6}} \quad (46)$$

Die Äquipotentialflächen sind reine Ellipsoidflächen, die für kleine Deformation δ im wesentlichen eine Quadrupol-deformation enthalten; so finden wir aus der Äquipotentialfläche am Kernrand:

$$(x^2 + y^2) \cdot (1 + \frac{2}{3}\delta) + z^2(1 - \frac{4}{3}\delta) = R_0^2 \quad (47)$$

bzw.

$$r = R \approx R_0 \cdot (1 + \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} \delta Y_{20}) \quad (48)$$

und damit $\delta = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \beta_0 = 0.95 \beta_0 \quad (49)$

Die Restwechselwirkung V_{rest} stellt formal die Differenz zwischen der Nukleon-Nukleon-Kraft und dem Einteilchen-Potential dar

$$V_{rest} = \sum_{i < k}^A V(i, k) - \sum_{i=1}^A V(i) \quad (50)$$

Hierbei ist mit $V(i)$ das Oszillatorpotential der l^2 -Term und die Spin-Bahn-Kopplung abgekürzt. Die Restwechselwirkung führt zu Korrelationen in der Wellenfunktion. Die am stärksten korrelierten Zustände in deformierten Kernen sind die Rotationen; da wir solche Anregungen kollektiv behandeln, kann der Einfluß der Restwechselwirkung auf die inneren Zustände durch einen einfachen Ansatz für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung approximiert werden, der keine Tensor- und Hard-core-Anteile enthält.

$$V(1,2) = V_0 e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 / \mu^2} (a_0 + a_\sigma \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + a_\tau \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 + a_{\sigma\tau} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 (\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2)) \quad (51)$$

Die Restwechselwirkung berücksichtigt die Nukleonen Korrelationen, die aus der Zwei-Teilchen-Kraft herrühren. Da die intrinsische Wellenfunktion in einem System berechnet wird, das nicht trägheitsfrei ist, treten auch in der kinetischen Rotations-Energie Terme auf, die zu Mehr-Teilchenkorrelationen führen.

2.2. Die Wellenfunktion.

Um das halbmikroskopische Modell zu lösen, gehen wir davon aus, daß die Rotation adiabatisch langsam gegenüber der intrinsischen Bewegung verläuft. Wir verschaffen uns daher zuerst die intrinsischen Zustände und bauen dann auf ihnen die Rotationsbanden auf.

Die Basiszustände der Vielteilchenwellenfunktionen sind die Nilssonzustände. Da das Nilssonmodell ein Ersatz für eine Hartree-Fock-Rechnung darstellt, finden wir den Deformationsparameter δ durch eine Minimalisierung der Grundzustandsenergie⁹:

$$0 = \frac{\partial E_0}{\partial \delta} = \frac{\partial}{\partial \delta} \left(\sum_{\alpha < F} \langle \alpha | T | \alpha \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha < F} \langle \alpha | V | \alpha \rangle \right) \quad (52)$$

V ist die potentielle Energie des Nilssonmodells, die Summen laufen über Zustände unterhalb der Fermikante. Diagonalisieren wir diese Basisfunktionen im Teilchen-Loch-Bild mit der Restwechselwirkung, so erhalten wir die Energien und Wellenfunktionen der intrinsischen Zustände.

$$\psi_{intr} = \chi_{\Omega} \quad (53)$$

Die Funktionen hängen von allen Teilchenkoordinaten ab. Folgende Quantenzahlen charakterisieren sie: Die Drehimpulskomponente Ω in z-Richtung des intrinsischen Systems, die Parität P und der Isospin T, T_z . Zusätzlich haben unsere Zustände mit $\Omega=0$ die Eigenschaft^{11,12}:

$$\chi_{\Omega=0}^* = (-1)^T \chi_{\Omega=0} \quad \text{mit} \quad T = \pm 1 \quad (54)$$

Zur Lösung des Rotationsanteils der Hamiltonfunktion gebrauchen wir Kreiselfunktionen. Da die Physik des Systems wie beim Rot-Vib-Modell invariant gegen eine Umbenennung der Achsen ist, fordern wir, daß auch die Wellenfunktionen

des Gesamtsystems gegenüber einer solchen Transformation unverändert bleiben. Wir setzen daher die Funktionen in der üblichen Weise so an, daß sie invariant gegenüber einer Drehung des intrinsischen Koordinatensystems um den Winkel $\tilde{\pi}$ um die körperfeste y-Achse und einer Drehung um $\tilde{\pi}$ um die z-Achse des gleichen Systems sind¹³. Für g-g-Kerne gilt (D_{MK}^I wie bei Edmonds¹⁴):

$$\psi = \sqrt{\frac{2I+1}{16\pi^2}} \left(D_{MK}^I \chi_{\Omega} + (-1)^I \cdot P \cdot D_{M-K}^I \chi_{-\Omega} \right) \quad (55)$$

mit $\chi_{-\Omega} = (-1)^{\Omega} \chi_{\Omega}^*$ und $|K-\Omega| = 0, 2, 4 \dots$

Hat ein intrinsischer Zustand $\Omega = 0$, $P = 1$ und ist $K = 0$, so baut sich auf ihm für $\tau = 1$ ein Rotationsspektrum mit geraden Drehimpulsen, für $\tau = -1$ ein Spektrum mit ungeraden auf:

$$K = \Omega = 0 :$$

$$\left. \begin{array}{ll} P=1 & \tau=1 \\ P=-1 & \tau=-1 \end{array} \right\} I=0,2,4 \dots \quad \left. \begin{array}{ll} P=1 & \tau=-1 \\ P=-1 & \tau=1 \end{array} \right\} I=1,3,5 \dots \quad (56)$$

Die tiefsten $\Omega = 0^+$ -bzw. 0^- -Niveaus haben $\tau = 1$, so daß im Niederenergie-Spektrum in der Regel die Bandenfolge $I = 0, 2, 4$, bzw. $I = 1, 3, 5$ auftritt.

Wir erhalten die ψ -Funktion des Gesamtsystems, wenn wir die Rotationsenergien mit den obigen symmetrisierten Basisfunktionen diagonalisieren.

Die intrinsischen Wellenfunktionen χ_{Ω} berücksichtigen nicht, daß im intrinsischen System die Massendeвиationsmomente verschwinden. Sie enthalten daher, abgesehen von den spuriosen Schwerpunktszuständen, spuriose Rotationszustände. Da die kinetische Energie der spuriosen Rotationsbewegung dem Gesamtdrehimpuls der intrinsischen Wellenfunktion proportional ist, sind Schwankungen in diesem Term ein Maß für die Rotations-Spuriosität. Rechnungen

in Ne^{20} ergeben eine Variation:

$$\langle \chi_r | (\Sigma_j)^2 | \chi_r \rangle = 15 - 40 \quad (57)$$

Dies läßt auf größere spuriose Rotationsbeiträge in der Wellenfunktion schließen. Um in leichten Kernen zu definitiven Aussagen für die intrinsische Energie zu gelangen, müssen wir daher im folgenden untersuchen, wie sich die Abhängigkeit der Teilchen-Koordinaten auf die inneren Zustände auswirkt.

2.3 Ableitung der klassischen kinetischen Energie mittels einer kanonischen Transformation.

Die kinetische Energie unseres Modells ist phänomenologisch aus dem Rotations-Vibrations-Modell abgeleitet worden. Wie zeigen nun mit einer Methode nach Villars⁶, daß sich die kinetische Energie eines Vielteilchensystems mit Hilfe einer kanonischen Transformation auf die gleiche Gestalt umformen läßt.

Die Koordinaten eines N-Teilchen-Systems im Labor werden auf ein körperfestes System transformiert, das schwerpunktsfrei und um die Eulerschen Winkel ϑ_j gedreht ist.

$$X_{i\alpha} = X_{\alpha} + R_{\alpha A}^{-1}(\vartheta_j) \cdot X'_{iA} \quad (58)$$

Der Index i kennzeichnet das Teilchen; α, β, γ sind die Achsen des Laborsystems, A, B, C die Achsen im gedrehten System. Über doppelt auftretende Indices wird summiert.

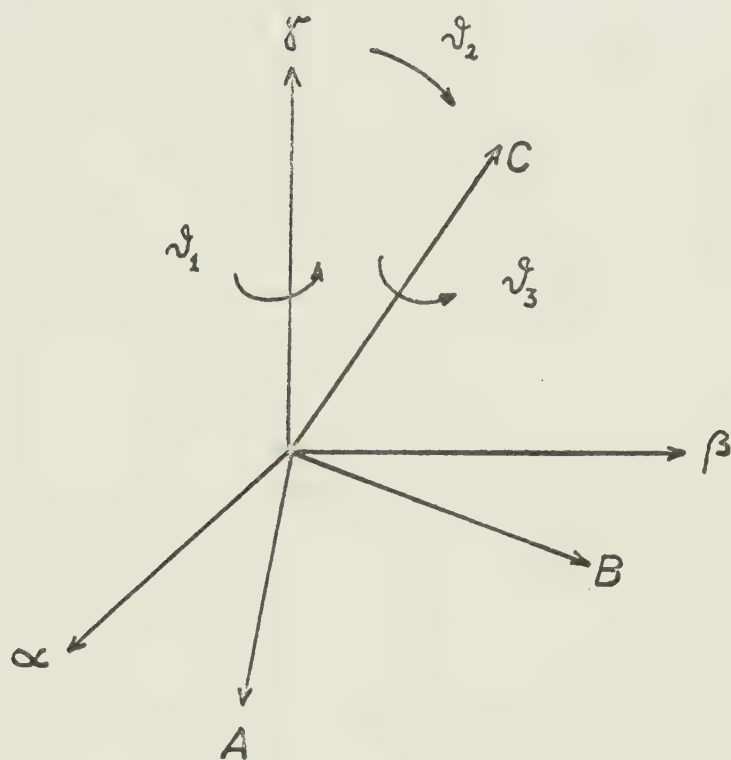


Fig.1 Laborsystem und körperfestes System

Für die Schwerpunktskoordinate $\bar{X}_\alpha$ gilt

$$\bar{X}_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_{i\alpha} \quad (59)$$

Daher müssen die intrinsischen Koordinaten X'_{iA} die Bedingung erfüllen:

$$\sum_{i=1}^N X'_{iA} = \sum_{i=1}^N X'_{iB} = \sum_{i=1}^N X'_{iC} = 0 \quad (60)$$

Um die Stellung des gedrehten Systems im Raum festzulegen, sind drei weitere Bedingungen für die X'_{iA} zu fordern. Wir verlangen, daß das innere System so gedreht wird, daß seine Deviationsmomente verschwinden:

$$\sum_{i=1}^N X'_{iA} X'_{iB} = \sum_{i=1}^N X'_{iB} X'_{iC} = \sum_{i=1}^N X'_{iC} X'_{iA} = 0 \quad (61)$$

Da 6 Bedingungen das gedrehte System definieren, bzw. 6 Koordinaten für Schwerpunkt und Rotation vergeben sind, dürfen die Koordinaten X'_{iA} nicht als unabhängige Koordinaten behandelt werden; sie hängen vielmehr von $3N-6$ unabhängigen, sogenannten inneren Koordinaten ξ_τ ab, die die 6 Randbedingungen identisch erfüllen und die wir im folgenden nicht näher definieren wollen.

$$X'_{iA} = X'_{iA}(\xi_\tau) \quad (62)$$

Wir führen eine klassische kanonische Transformation der $3N$ Koordinaten und Impulse

$$X_{i\alpha}, p_{i\alpha} \quad (63)$$

auf die $3N$ neue Koordinaten und Impulse⁺ aus:

$$\bar{X}_\alpha, P_\alpha; \mathcal{Q}_j, \pi_j; \xi_\tau, \pi_\tau \quad (64)$$

$p_{i\alpha}$ formt sich wie folgt um:

$$p_{i\alpha} = \frac{\partial X_\alpha}{\partial X'_{i\alpha}} P_\alpha + \frac{\partial \mathcal{Q}_j}{\partial X'_{i\alpha}} \pi_j + \frac{\partial \xi_\tau}{\partial X'_{i\alpha}} \pi_\tau \quad (65)$$

Im einzelnen ergibt sich

$$a) \quad \frac{\partial X_\alpha}{\partial X'_{i\alpha}} = \frac{1}{N} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} b) \quad \frac{\partial \mathcal{Q}_j}{\partial X'_{i\alpha}} \pi_j &= \frac{\partial \mathcal{Q}_j}{\partial X'_{i\alpha}} \frac{\partial X'_{i\beta}}{\partial \mathcal{Q}_j} p_{i\beta} = \frac{\partial \mathcal{Q}_j}{\partial X'_{i\alpha}} \frac{\partial R_{\beta A}^{-1} X'_{iA}}{\partial \mathcal{Q}_j} p_{i\beta} \\ &= (X_{i\beta} - \bar{X}_\beta) R_{\beta A} \frac{\partial R_{\beta A}^{-1}}{\partial X'_{i\alpha}} p_{i\beta} = -R_{\beta A}^{-1} \frac{\partial R_{\beta A}}{\partial X'_{i\alpha}} (X_{i\beta} - \bar{X}_\beta) p_{i\beta} \end{aligned} \quad (67)$$

⁺ $P_\alpha, \pi_j, \pi_\tau$ seien vorerst klassische, vertauschbare Impulse.

Mit der Abkürzung $p_{iA} = R_{A\beta} p_{i\beta}$ wird (67):

$$\frac{\partial \vartheta_j}{\partial X_{i\alpha}} \pi_j = \frac{1}{2} \sum_{A,B} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} (X'_{iA} p_{iB} - X'_{iB} p_{iA}) \quad (68)$$

Der Ausdruck

$$\begin{aligned} L_C = L_{AB} &= \sum_i X'_{iA} p_{iB} - X'_{iB} p_{iA} \\ &= \sum_{\alpha, \beta} R_{A\alpha} R_{B\beta} \{ (X_{i\alpha} p_{i\beta} - X_{i\beta} p_{i\alpha}) - (X_{\alpha} p_{\beta} - X_{\beta} p_{\alpha}) \} \quad (69) \end{aligned}$$

ist der Gesamtdrehimpuls des N-Teilchensystems bezogen auf körperfeste Achsen (ohne Spin).

c) Für das intrinsische System definieren wir die sogenannten intrinsischen Impulse:

$$p'_{iA} = \sum_{\sigma, \tau} \frac{\partial X'_{iA}}{\partial \vartheta_{\sigma}} D_{\sigma\tau} \pi_{\tau} \quad (70)$$

wobei $D_{\sigma\tau}$ die Umkehrmatrix von

$$D_{\sigma\tau}^{-1} = \sum_{i,A} \frac{\partial X'_{iA}}{\partial \vartheta_{\sigma}} \cdot \frac{\partial X'_{iA}}{\partial \vartheta_{\tau}} \quad (71)$$

bezeichnet. Mit diesen Hilfsgrößen berechnet sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vartheta_{\tau}}{\partial X_{i\alpha}} \pi_{\tau} &= \frac{\partial \vartheta_{\tau}}{\partial X_{i\alpha}} \frac{\partial X'_{iA}}{\partial \vartheta_{\tau}} p'_{iA} = \frac{\partial \vartheta_{\tau}}{\partial X_{i\alpha}} \cdot \frac{\partial X_{i\alpha'}}{\partial \vartheta_{\tau}} R_{A\alpha'} p'_{iA} \\ &= R_{A\alpha'} p'_{iA} - \frac{\partial \vartheta_j}{\partial X_{i\alpha}} \cdot \frac{\partial X_{i\alpha'}}{\partial \vartheta_j} R_{A\alpha'} p'_{iA} \quad (72) \\ &= R_{A\alpha} p'_{iA} - \frac{1}{2} \sum_{A,B} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} (X'_{iA} p'_{iB} - X'_{iB} p'_{iA}) \end{aligned}$$

In der Klammer steht der sogenannte intrinsische Drehimpuls, bezogen auf das körperfeste System.

$$L'_C = L'_{AB} = \sum_i X'_{iA} p'_{iB} - X'_{iB} p'_{iA} \quad (73)$$

Zusammengefaßt finden wir für $p_{i\alpha}$ die Villars-
sche Transformation ⁶

$$p_{i\alpha} = \frac{1}{N} P_\alpha + R_{A\alpha} p'_{iA} + \frac{1}{2} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X'_{i\alpha}} (L_{AB} - L'_{AB}) \quad (74)$$

Da wir eine klassische kanonische Transformation ausführen, brauchen wir beim Quadrieren nicht auf Vertauschungsrelationen zu achten. Wir finden so den Ausdruck von Villars, der keine Kreuzterme zwischen den einzelnen Impulsen enthält:

$$\sum_{i,\alpha} \frac{p_{i\alpha}^2}{2M} = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2NM} + \sum_{i,A} \frac{p_{iA}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{A < B} Q_{AB} (L_A - L'_A) (L_B - L'_B) \quad (75)$$

mit dem reziproken Trägheitstensor

$$M Q_{AB} = \sum_{i,\alpha} R_{C\gamma} \frac{\partial R_{B\gamma}}{\partial X'_{i\alpha}} R_{A\gamma'} \frac{\partial R_{C\gamma'}}{\partial X'_{i\alpha}} \quad (76)$$

Die Kreuzterme verschwinden wegen

$$\sum_{i,\alpha} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X'_{i\alpha}} R_{A\alpha} p'_{iA} = \sum_{i,\alpha} R_{B\gamma} \left(\frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X'_{i\alpha}} \frac{\partial X'_{i\alpha}}{\partial \xi^\sigma} \right) D_{\sigma\tau} \pi_\tau = 0 \quad (77)$$

Der Trägheitstensor kann, ohne daß wir die intrinsischen Koordinaten ξ^σ kennen, explizit angegeben werden; hierzu brauchen wir nur die Deviationsmomente nach $X_{i\alpha}$ zu differenzieren:

$$\frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \sum_j X'_{jA} X'_{jB} = 0 \quad (78)$$

$$(I_A - I_B) R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} = X'_{iA} R_{B\alpha} + X'_{iB} R_{A\alpha} \quad (79)$$

mit.

$$I_A = \sum_{i=1}^N X'^2_{iA} \quad (80)$$

Der Trägheitstensor wird bei dieser Wahl des intrinsischen Systems diagonal und nimmt den selben Wert wie die hydrodynamischen Trägheitsmomente an:

$$Q_{AA}^{-1} = \Theta_A = M \frac{(I_B - I_C)^2}{I_B + I_C} \quad (81)$$

Damit schreibt sich der klassische Ausdruck der kinetischen Energie in der alten Form, wie wir ihn in 2.1 phänomenologisch hergeleitet haben.

$$T = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2NM} + \sum_{i,A} \frac{P'^2_{iA}}{2M} + \frac{1}{2} \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (L_A - L'_A)^2 \quad (82)$$

Aus der Ableitung ersieht man, daß p'_{iA} und X'_{iA} keine kanonisch konjugierten Größen sind. Die Impulse p'_{iA} sollten daher bei einer Quantisierung nicht durch die Ableitungen nach X'_{iA} ersetzt werden. In schweren Kernen ist die Zahl der Freiheitsgrade sehr groß gegenüber der Zahl der explizit behandelten Rotations-Koordinaten. Wir dürfen in solchen Kernen die inneren Impulse p'_{iA} in guter Näherung als kanonisch konjugiert zu den X'_{iA} auffassen; denn der Fehler geht mit der Teilchen-Zahl gegen Null, was unter anderem im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

2.4 Die Abhängigkeit der körperfesten Koordinaten und Impulse.

Der obige Ausdruck (82) für die kinetische Energie eines Vielteilchensystems ist klassisch. In der Quantenmechanik müssen die Impulse wie folgt ersetzt werden:

$$p_{i\alpha} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \quad \text{und} \quad p_{\alpha} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_{\alpha}}, \quad \pi_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial g_j}, \quad \pi_L = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (83)$$

Beim Quadrieren von $p_{i\alpha}$ entstehen daher Mischterme, die nicht so leicht wie im klassischen Fall aus T herausfallen.

2.41 Die intrinsischen Drehimpulse L'_A .

Ohne innere Koordinaten $\mathcal{G}_C$ explizit zu gebrauchen, bestimmen wir die Eigenschaften der Operatoren L'_A . Hierzu berechnen wir durch partielles Differenzieren (ohne $\hbar/i$):

$$\begin{aligned} p_{iA} X'_{jC} &= R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} X'_{jC} \\ &= \delta_{AC} \left(\delta_{ij} - \frac{1}{N} \right) + \sum_{K \neq C} \frac{\delta_{AK} X'_{iC} + \delta_{AC} X'_{iK}}{I_C - I_K} X'_{jK} \end{aligned} \quad (84)$$

Dieses Resultat wird in Anhang C.1 ausführlich abgeleitet.

Wegen $\sum_i X'_{iA} X'_{iB} = 0$ finden wir mit (70):

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,C} (X'_{iA} R_{B\alpha} + X'_{iB} R_{A\alpha}) R_{C\alpha} p'_{iC} &= \sum_i X'_{iA} p'_{iB} + X'_{iB} p'_{iA} \\ &= \sum_i \frac{\partial X'_{iA} X'_{iB}}{\partial \mathcal{G}_C} D_{TC} \frac{\partial}{\partial \mathcal{G}_C} = 0 \end{aligned} \quad (85)$$

Damit ergibt sich mit Hilfe der Gleichung (79) für $p_{i\alpha}$ und der Gleichung (69) für L :

$$\sum_{i,\alpha} (X'_{iA} R_{B\alpha} + X'_{iB} R_{A\alpha}) p_{i\alpha} = \frac{I_A + I_B}{I_A - I_B} (L_{AB} - L'_{AB}) \quad (86)$$

oder

$$L'_{AB} = \frac{2}{I_A + I_B} \sum_i I_B X'_{iA} p_{iB} - I_A X'_{iB} p_{iA} \quad (87)$$

mit

$$p_{iA} = R_{A\alpha} p_{i\alpha} \quad (88)$$

Ist die C-Achse eine Achse mit Rotations-Symmetrie, so werden die beiden Trägheitsmomente I_A und I_B gleich. Der intrinsische Drehimpuls geht dann in die entsprechende Komponente des Gesamtdrehimpulses über:

$$\text{für } I_A = I_B : L'_{AB} \Rightarrow L_{AB}$$

Mit L'_{AB} und $p_{iA} X'_{jC}$ ergibt sich

$$L'_{AB} X'_{jC} = \frac{1}{I_A + I_B} (2I_B X'_{jA} \delta_{BC} - 2I_A X'_{jB} \delta_{AC}), \quad (89)$$

Die letzte Relation steht auch bei Villars⁶, aber ohne Ableitung.

Die Trägheitsmomente I_A sind mit den intrinsischen Drehimpulsen vertauschbar.

$$[L'_{AB}, I_A, I_B, I_C] = 0 \quad (90)$$

Auf Funktionen, die ausschließlich von den Koordinaten X'_{iA} abhängen, operiert L' folgendermaßen:

$$L'_{AB} = \frac{2}{I_A + I_B} \sum_i I_B X'_{iA} \frac{\partial}{\partial X'_{iB}} - I_A X'_{iB} \frac{\partial}{\partial X'_{iA}} \quad (91)$$

Auch die Vertauschungsregeln für $L'_{AB} = L'_C$ lassen sich gewinnen.

$$L'_A L'_B - L'_B L'_A =$$

$$\begin{aligned} & \frac{2}{I_A + I_C} L'_A \sum_i (I_A X'_{iC} R_{A\alpha} - I_C X'_{iA} R_{C\alpha}) \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \\ & - \frac{2}{I_B + I_C} L'_B \sum_i (I_C X'_{iB} R_{C\alpha} - I_B X'_{iC} R_{B\alpha}) \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \end{aligned} \quad (92)$$

Mit $[L', I] = 0$, $[L', R] = 0$ und Gleichung (89) entsteht die Relation (ohne $\hbar/c$):

$$L'_A L'_B - L'_B L'_A = - \frac{2 I_C (I_A + I_B)}{(I_A + I_C)(I_B + I_C)} L'_C \quad (93)$$

Da die Trägheitsmomente mit den Drehimpulsen L' kommutieren, benehmen sie sich in den Vertauschungsrelationen wie reine Zahlenfaktoren. Wir können daher neue Drehimpulse $\tilde{L}$ einführen, die den gewohnten Vertauschungsregeln genügen (mit $\hbar/i$):

$$\tilde{L}'_C = \tilde{L}'_{AB} = \frac{I_A + I_B}{2(I_A + I_B)} L'_{AB} \quad \text{analog} \quad \tilde{L}'_A, \tilde{L}'_B \quad (94)$$

mit

$$\tilde{L}'_A \tilde{L}'_B - \tilde{L}'_B \tilde{L}'_A = i \hbar \tilde{L}'_C \quad (95)$$

2.42 Die intrinsischen Impulse p'_{iA}

Da wir die Wirkung von L'_A auf X'_{iA} mit Gleichung (89) kennen, lassen sich auch Ausdrücke wie $p'_{iA} X'_{jC}$ bestimmen.

Wir kehren die Gleichung (74) für $p_{i\alpha}$ um und benutzen neben (79), daß $R^{-1}_{\alpha A} = R_{A\alpha}$ ist:

$$p'_{iA} = R_{A\alpha} (p_{i\alpha} - \frac{1}{N} p_{\alpha}) - \sum_{K \neq A} \frac{X'_{iK}}{I_A - I_K} (L_{AK} - L'_{AK}) \quad (96)$$

Wir erhalten mit (84) und (96), sowie $LX' = 0$ und (89):

$$p'_{iA} X'_{jC} = \delta_{AC} (\delta_{ij} - \frac{1}{N}) - \sum_{K \neq A} \frac{X'_{jK} X'_{iK} \delta_{AC} + X'_{jA} X'_{iC} \delta_{CK}}{I_A + I_K} \quad (97)$$

Würden die Impulse p'_{iA} zu den Koordinaten X'_{iA} kanonisch konjugiert sein, so müßte gelten:

$$p'_{iA} X'_{jC} \Rightarrow \delta_{AC} \delta_{ij} \quad (98)$$

Die weiteren Anteile in der obigen Gleichung rühren davon her, daß die Koordinaten X'_{iA} schwerpunktsfrei sind und daß in ihnen die Deviationsmomente verschwinden. Die Abweichungen vom gewohnten Resultat liegen in der Größenordnung $1/N$, was man aus den Spezialfällen erkennt.

$$p'_{iA} X'_{iA} = 1 - \frac{1}{N} - \frac{X'^2_{iB}}{I_A + I_B} - \frac{X'^2_{iC}}{I_A + I_C} \quad (99)$$

$$p'_{iA} X'_{jB} = - \frac{X'_{jA} X'_{iB}}{I_A + I_B} \quad (100)$$

Die Summe

$$\sum_{i,A} p'_{iA} x'_{iA} = 3N - 6 \quad (101)$$

weist augenfällig auf die 6 einschränkenden Bedingungen für die intrinsischen Koordinaten x'_{iA} hin.

Die Vertauschungsregeln $[p'_{iA}, p'_{jB}]$ können ausgerechnet werden, führen aber auf unhandliche Ausdrücke.

2.43 Der Operator der kinetischen Energie

Nach diesen vorbereitenden Bemerkungen über die Abhängigkeit der intrinsischen Koordinaten quadrieren wir schrittweise den Operator $\frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}}$ (ohne $\hbar/i$):

$$\sum_{i,\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_{i\alpha}^2} = \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left\{ \frac{1}{N} p_{\alpha} + R_{A\alpha} p'_{iA} + \frac{1}{2} (R_{BY} \frac{\partial R_{AY}}{\partial x_{i\alpha}} (L_{AB} - L'_{AB})) \right\} \quad (102)$$

Wir finden für die folgenden Operatoren in Anhang C.2 die Ausdrücke

$$1. \quad \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \frac{1}{N} p_{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} p_{\alpha}^2 \quad (103)$$

$$2. \quad \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} R_{A\alpha} p'_{iA} = \sum_{i,D} p_{iD}^2 + \frac{1}{2\theta_{ABCE}} \sum_{i,D} (p'_{iD} \theta_{ABCE}) p'_{iD} \quad (104)$$

$$3. \quad \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} R_{BY} \frac{\partial R_{AY}}{\partial x_{i\alpha}} (L_{AB} - L'_{AB}) = M \sum_A \frac{1}{\theta_A} (L_A - L'_A)^2 \quad (105)$$

mit $L_A = L_{BC}$ usw.

Der Operator L_A ist der Drehimpulsoperator, bezogen auf die körperfesten Achsen. Er dreht das gesamte körperfeste System, dessen räumliche Stellung durch Eulersche Winkel bestimmt ist; er hängt daher einzig von den Eulerschen Winkeln ab und wirkt auch nur auf diese. Seine Eigenschaften werden in Anhang B näher untersucht. Insbesondere erfüllt L_A die Vertauschungsregel mit einem Minus-Zeichen:

$$L_A L_B - L_B L_A = -i\hbar L_C \quad (105a)$$

Zusammenfassend erhalten wir für den Operator der kinetischen Energie

$$\begin{aligned} 2T = & \frac{1}{MM} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 + \frac{1}{M} \frac{1}{(\theta_A \theta_B \theta_C)^{1/2}} \sum_{i,D} P_{i,D}^1 (\theta_A \theta_B \theta_C)^{1/2} P_{i,D}^1 \\ & + \sum_A \frac{1}{\theta_A} (L_A - L_A')^2 \end{aligned} \quad (106)$$

Bisher haben wir L_A als Bahndrehimpuls des Systems behandelt. Wenn wir den Spin der Nukleonen auch auf das intrinsische System transformieren, so dreht L_A nicht nur die räumlichen, sondern auch die Spinanteile der Wellenfunktion. L_A ist dann der Gesamtdrehimpuls J_A (siehe Anhang B). Der Bahndrehimpuls muß durch

$$J_A - S_A \quad (107)$$

ersetzt werden, wobei S_A der Gesamtspinoperator im intrinsischen System ist.

$$S_A = \sum_i S_{iA} \quad (108)$$

Kürzen wir mit

$$J_A' = L_A' + S_A \quad (109)$$

den sogenannten Gesamtdrehimpuls des intrinsischen Systems ab, so schreibt sich T:

$$2T = \frac{1}{NM} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 + \frac{1}{M} \sum_{i,A} p_{iA}^2 + \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (j_A - j'_A)^2 + \frac{1}{2M \Theta_A \Theta_B \Theta_C} \sum_{i,D} (p'_{iD} \Theta_A \Theta_B \Theta_C) p'_{iD} \quad (110)$$

Der letzte Ausdruck in T kann durch eine Renomierung der Wellenfunktion in ein Zusatzpotential verwandelt werden:

$$\tilde{\psi} = \frac{1}{\sqrt{g}} \psi \quad \text{mit} \quad g = \frac{1}{\Theta_A \Theta_B \Theta_C} \quad (111)$$

Lassen wir T auf $\tilde{\psi}$ statt auf ψ wirken, so hat T die Form:

$$2\tilde{T} = \frac{1}{NM} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 + \frac{1}{M} \sum_{i,A} p_{iA}^2 + \sum_{i,A} \frac{1}{\Theta_A} (j_A - j'_A)^2 + \frac{1}{M \sqrt{g}} \sum_{i,A} (p'_{iA} \sqrt{g}) - \frac{2}{M \sqrt{g}} \sum_{i,A} (p'_{iA} \sqrt{g})^2 \quad (112)$$

Als wichtigstes Ergebnis, weswegen wir die Transformation für T durchgeführt haben, entnehmen wir, daß die Eulerschen Winkel nur in dem Summand

$$\frac{1}{2} \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (j_A - j'_A)^2 \quad (113)$$

in T vorkommen. Alle übrigen Terme lassen sich durch die Schwerpunktskoordinaten $\bar{X}_\alpha$ und innere Koordinaten ζ_τ ausdrücken und mit J vertauschen.

Würden die Wellenfunktionen von den Koordinaten X'_{iA} abhängen, so könnten alle Operationen von p' und L' auf die abhängigen intrinsischen Koordinaten ausgeführt werden. Jedoch bliebe unbekannt, wie die Funktion zu normieren wäre; denn das Volumenelement

$$dV = \prod_{i,\alpha} dX_{i\alpha} \quad (114)$$

läßt sich für das transformierte System nicht ohne explizite Kenntnis der inneren Variablen ζ_τ angeben. Bekannt ist nur, daß dV in Eulersche Winkel, Schwerpunkts- und innere Koordinaten separiert:

$$dV = d\Omega \cdot \prod_{\alpha} dX_{\alpha} \cdot F(\zeta_\tau) \cdot \prod_{\tau} d\zeta_{\tau} \quad (115)$$

Es hat daher keinen Wert, die abhängigen Koordinaten in einer Vielteilchenwellenfunktion als Variable zu verwenden.

III. Die Projektion spurioser Rotationszustände

Eine Reihe prinzipieller Fragen sind beim Projizieren spurioser Rotationszustände zu beachten:

Im Gegensatz zur Schwerpunktskoordinate kann der Zusammenhang zwischen Eulerschen Winkeln und Teilchenkoordinaten willkürlich definiert werden. Jede Transformation teilt die kinetische Energie in anderer Weise auf, aber so, daß niemals Rotations- und intrinsische Bewegung entkoppeln. Daher ist der Begriff "intrinsischer Zustand" von zweierlei Dingen abhängig: von der Definition der Euler - Winkel und von der Definition der intrinsischen kinetischen Energie.

Wir beschreiben das Vielteilchensystem mit zu vielen Koordinaten, mit den Euler - Winkeln und sämtlichen Nukleonenkoordinaten. Die verwendeten Wellenfunktionen gehören daher zu einem $(3A + 3)$ - dimensional System. Drei zusätzliche Freiheitsgrade sind vollkommen unbestimmt und nicht in der Hamiltonfunktion der A Teilchen enthalten. Wir fixieren die drei Freiheitsgrade als die drei Rotationsfreiheitsgrade, die die Teilchenkoordinaten noch in sich bergen. Werden die Teilchenkoordinaten in der Wellenfunktion auf das intrinsische System transformiert, so findet man neben den intrinsischen Koordinaten gerade die drei Rotationskoordinaten, die wir der spuriosen Rotation zuordnen. Durch eine zusätzliche Energie in der Hamiltonfunktion wird erzwungen, daß das $(3A + 3)$ - dimensionale System in diesen drei spuriosen Freiheitsgraden eine ungestörte, nichtphysikalische Bewegung ausführt. Haben alle Wellenfunktionen die gleiche spuriose Rotation, so ist die $(3A + 3)$ - dimensionale

Mannigfaltigkeit der Wellenfunktionen auf eine $3A$ - dimensionale verkleinert. Die Teilchenkoordinaten beschreiben dann nur intrinsische Bewegungen des A - Teilchensystems. Die Rotation der A Teilchen im Raum wird, wie erwähnt, explizit mit Eulerschen Winkeln behandelt.

3.1 Die allgemeine Methode

Die Hamiltonfunktion eines Vielteilchen - Systems ist rotationsinvariant, wenn die Kräfte von den Relativkoordinaten der Teilchen abhängen. Wir transformieren die Hamiltonfunktion

$$H = \sum_i T_i + \sum_{i < k} V_{ik} + W(R) \quad (116)$$

auf Rotationskoordinaten $\mathcal{G}_j$ und $3A - 3$ innere Koordinaten $\mathcal{L}_\sigma$. Wir rechnen vorübergehend auch die Schwerpunktskoordinaten zu den inneren Koordinaten und fügen ein Schwerpunkts - Potential in H ein, um diskrete Eigenwerte für H zu erhalten.

$$H = H_{\text{rot}}(\mathcal{G}_j, \mathcal{L}_\sigma) + H_{\text{intr}}(\mathcal{L}_\sigma) \quad (117)$$

H_{rot} umfaßt alle Kopplungsterme zwischen den Rotations- und intrinsischen Koordinaten und stammt ausschließlich aus der kinetischen Energie.

Die Lösungen von H

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (118)$$

können nach einem orthogonalen Satz von Basisfunktionen entwickelt werden.

$$\psi_n = \sum_{k,i} a_{ki}^n D_k(\vartheta_j) \cdot \varphi_i(\zeta_\sigma) \quad (119)$$

Als Basissystem φ_i , das an sich beliebig sein darf, können wir die Lösungen der intrinsischen Hamiltonfunktion wählen:

$$H_{\text{int}}(\zeta_\sigma) \varphi_i(\zeta_\sigma) = \epsilon_i \varphi_i(\zeta_\sigma), i = 0, 1, 2, \dots \quad (120)$$

Wir wollen die von ζ_σ abhängigen Anteile der Wellenfunktion, d.h. die intrinsische Bewegung, mit Teilchenkoordinaten ausdrücken. Hierzu führen wir unabhängige Teilchenkoordinaten $\bar{r}_i$ ein, die in einem neuen Laborsystem gemessen werden; es sei gegen das intrinsische System um die Winkel $\bar{\vartheta}_j$ gedreht. Die Variablen $\bar{r}_i$ mögen in der gleichen Weise wie die ursprünglichen Teilchenkoordinaten r_i mit den inneren Koordinaten ζ_σ verknüpft sein. x)

$$\bar{r}_i = R(\bar{\vartheta}_j, \zeta_\sigma), \quad \text{wenn} \quad r_i = R(\vartheta_j, \zeta_\sigma) \quad (121)$$

Wir suchen nun Wellenfunktionen in den Koordinaten $\bar{r}_i$, die nach der Umformung auf innere Koordinaten separieren und die gesuchten Basisfunktionen als Faktor enthalten:

$$\Phi_k(\bar{r}_i) = \varphi_i(\zeta_\sigma) d_k(\bar{\vartheta}_j) \quad (122)$$

x) Wir machen darauf aufmerksam, daß unser Verfahren, neue Variable $\bar{\vartheta}$ in (121) einzuführen, äquivalent ist der Methode der redundanten Variablen⁴, wo man folgende Transformation ausführt:

$$\bar{\vartheta}_j, r_i \leftrightarrow \vartheta_j, \bar{r}_i$$

ϕ_k muß daher einer Hamiltonfunktion genügen, die in die beiden Koordinatentypen $\bar{\mathcal{J}}$ und $\mathcal{L}_0$ aufspaltet; einer ihrer Bestandteile muß Hintr. sein.

$$\bar{H} = H_{\text{intr}}(\mathcal{L}_0) + H'_{\text{rot}}(\bar{\mathcal{J}}) \quad (123)$$

Vom neuen Koordinatensystem aus gesehen, beschreibt $\bar{H}$ die gleiche intrinsische Bewegung wie H . Das körperfeste System rotiert, ohne mit der intrinsischen Bewegung verkoppelt zu sein.

Die Rotationshamiltonfunktion habe die diskreten Energien R_λ .

$$H'_{\text{rot}}(\bar{\mathcal{J}}) d_\lambda(\bar{\mathcal{J}}) = R_\lambda d_\lambda(\bar{\mathcal{J}}), \quad \lambda = 0, 1, 2, \dots \quad (124)$$

Diagonalisieren wir die beiden kommutierenden Hamiltonfunktionen in den Koordinaten $\bar{\tau}_i$

$$\bar{H}(\bar{\tau}_i) \phi_k(\bar{\tau}_i) = \bar{E}_k \phi_k(\bar{\tau}_i) \quad (125)$$

mit

$$\bar{E}_k = E_i + R_\lambda$$

und

$$(126)$$

$$H'_{\text{rot}}(\bar{\tau}_i) \phi_k(\bar{\tau}_i) = R_\lambda \phi_k(\bar{\tau}_i),$$

so lassen sich, wie beim Schwerpunkt, alle Zustände erkennen, die intrinsisch gleich sind, aber eine verschiedene Rotationsanregung haben. Beschränken wir die spuriosen Rotationen auf den nichtentarteten Grundzustand, so gewinnen wir Wellenfunktionen, die in den Koordinaten $\mathcal{L}_0$ und $\bar{\mathcal{J}}$ separieren.

$$\phi_i(\bar{\tau}_i) = \varphi_i(\mathcal{L}_0) \cdot d_0(\bar{\mathcal{J}}) \quad (127)$$

Die Funktionen ϕ_i enthalten alle die gleiche spuriose Rotationsbewegung und sind ein vollwertiger

Ersatz für das Basissystem φ_i . Sie können daher in die Entwicklung der Wellenfunktion anstelle der Funktionen φ_i in (119) eingesetzt werden.

$$\psi'_n = \sum_{k,i} a_{ki}^n D_k(\bar{\vartheta}_j) \phi_i(\bar{r}_i) = d_n(\bar{\vartheta}_j) \cdot \psi_n(\bar{r}_i) \quad (128)$$

Die neuen Wellenfunktionen ψ'_n hängen von $3A + 3$ Variablen ab; denn mit den neuen Winkeln $\bar{\vartheta}_j$ sind drei zusätzliche Freiheitsgrade eingeführt worden.

ψ'_n löst die um H' rot erweiterte Hamiltonfunktion

$$H' \psi'_n = (E_n + R_o) \psi'_n \quad (129)$$

$$\text{mit } H' = H + H'_{\text{rot}}(\bar{\vartheta}_j) \quad (130)$$

und ist gleichzeitig in H' rot diagonal

$$H'_{\text{rot}} \psi'_n = R_o \psi'_n \quad (131)$$

Gehen wir in H' zu den Koordinaten $\bar{r}_i$ über,

$$H' = H_{\text{rot}}(\bar{\vartheta}_j, \bar{r}_i) + H_{\text{int}}(\bar{r}_i) + H'_{\text{rot}}(\bar{r}_i), \quad (132)$$

so gewinnen wir eine Hamiltonfunktion, die folgende Eigenschaften aufweist;

H' beschreibt ein System mit $3A + 3$ Freiheitsgraden durch die $3A$ Teilchenkoordinaten $\bar{r}_i$ und die drei kollektiven Euler-Winkel $\bar{\vartheta}_j$. Bei einer Transformation der Teilchenkoordinaten $\bar{r}_i$ auf innere Koordinaten $\bar{\varrho}_e$ und Eulersche Winkel $\bar{\vartheta}_j$ separiert die in der Teilchenbewegung steckende spuriose Rotation vollkommen ab. Die restliche

Hamiltonfunktion ist die Hamiltonfunktion des A-Teilchensystems. Die Wellenfunktionen können daher in die Wellenfunktion des A-Teilchensystems und die des spuriösen Rotators aufspalten.

Die in der Teilchenbewegung steckende Rotation wird nach dem gleichen Schema absepariert, wie es beim Schwerpunkt geschah. Man erkennt die vollkommene Analogie mit der Projektion der Schwerpunktsbewegung, wenn wir für beide Fälle die entsprechenden Koordinaten und Hamiltonfunktionen einander gegenüberstellen.

$$\vec{R} \leftrightarrow \vec{v}_j \quad (133)$$

$$\frac{P^2}{2AM} + W(\vec{R}) \leftrightarrow H'_{\text{rot}}(\vec{v}_j) \quad (134)$$

Lipkin⁵ kommt auf einem anderen Weg zu der Hamiltonfunktion H' , Gl. (132). Er addiert zur Hamiltonfunktion des A-Teilchensystems einen Rotator, der von dreineuen Koordinaten $\vec{\mathcal{J}}_j$ abhängt:

$$H(\vec{\mathcal{J}}_j, \varphi_5) + H'_{\text{rot}}(\vec{v}_j) \quad (135)$$

und führt dann eine triviale kanonische Transformation aus; sie vertauscht einzig die Koordinaten $\vec{\mathcal{J}}_j$ und $\vec{v}_j$.

$$\vec{\mathcal{J}}_j = \vec{v}_j, \quad \vec{v}_j = \vec{\mathcal{J}}_j \quad (136)$$

Wird die neue Hamiltonfunktion auf die ursprünglichen Laborkoordinaten r_i zurücktransformiert, so entsteht die gleiche Hamiltonfunktion H' wie oben, Gl. (132), wenn wir noch r_i durch $\vec{r}_i$ und $\vec{\mathcal{J}}_j$ durch $\vec{v}_j$ ersetzen.

Die Lipkinsche Transformation läßt den physikalischen Hintergrund erkennen: Man vertauscht die kollektive Bewegung des Systems mit der Bewegung eines Rotators. Nach der trivialen Transformation finden wir die kollektive Rotation des A-Teilchensystems als neuen Rotator, während in die Teilchenbewegung eine spuriose unphysikalische Rotationsbewegung eingeht.

3.2 Ein praktisches Verfahren zur Projektion

Die Methode zur Projektion spurioser Rotationsbewegung läßt sich nicht so allgemein wie im Falle des Schwerpunkts formulieren; denn jedes Verfahren, das nach den Prinzipien des vorangegangenen Abschnitts entwickelt wird, hängt davon ab, mit welcher kanonischen Transformation die Euler Winkel eingeführt werden. Wir entwickeln im folgenden für die in 2.3 angegebene Transformation einen praktischen Weg, die intrinsische Bewegung in Laborkoordinaten $\bar{r}_1$ darzustellen.

Wir bezeichnen das neue Laborsystem mit den Koordinaten $\bar{r}_1$ als Hilfssystem. Die willkürliche Hamiltonfunktion des zusätzlichen Rotators bestimmt, um welchen Winkel das körperfeste System im Hilfssystem gedreht wird. Um das Hilfssystem dem körperfesten möglichst ähnlich zu machen, wählen wir eine Rotatorhamiltonfunktion, die dem körperfesten System nur kleine Drehungen im Hilfssystem erlaubt. Das Hilfssystem übernimmt dann die Funktion eines Inertialsystems für das körperfeste System.

Die nur wenig unterschiedliche Lage des Hilfssystems

zum körperfesten ermöglicht es, alle Operatoren des intrinsischen Systems auf das Hilfssystem zu transformieren; denn wir können die Eulerschen Winkel für kleine $\bar{\mathcal{V}}_j$ nach der Teilchenkoordinaten $\bar{r}_i$ des Hilfssystems entwickeln.

3.2 1 Die Abhängigkeit der Eulerschen Winkel von Teilchenkoordinaten

Die Eulerschen Winkel sind implizit mit dem Verschwinden der Deviationsmomente (61) definiert. Da sich die Koordinaten $\bar{X}_{i\alpha}$ des Hilfssystems in der gleichen Weise wie die ursprünglichen Laborkoordinaten (58) auf das körperfeste System transformieren, genügen die Winkel $\bar{\mathcal{V}}_j$ der Gleichung:

$$\sum_i X_{iA}' X_{iB}' = \sum_{\alpha, \beta} R_{A\alpha}(\bar{\mathcal{V}}_j) R_{B\beta}(\bar{\mathcal{V}}_j) (\bar{X}_{i\alpha} - \bar{X}_{\alpha}) (\bar{X}_{i\beta} - \bar{X}_{\beta}) \quad (137)$$

Das sind drei transzendente Gleichungen für die drei Winkel $\bar{\mathcal{V}}_j$, die wir nicht allgemein auflösen können. Jedoch ist für kleine Winkel eine Entwicklung möglich.

Wir gebrauchen eine abweichende Definition der Euler Winkel, um das körperfeste System im Hilfssystem festzulegen. Die üblichen Eulerschen Winkel führen für kleine Winkel auf eine singuläre Transformation, da Drehungen um die raumfeste und körperfeste z - Achse ununterscheidbar werden. Wir definieren daher die Euler Winkel folgendermaßen:

1. Drehung um die raumfeste z-Achse um $\bar{\mathcal{V}}_z$
2. Drehung um die neue y-Achse um $\bar{\mathcal{V}}_y$ (138)
3. Drehung um die körperfeste x'-Achse um $\bar{\mathcal{V}}_x$

Die beiden ersten Drehungen sind mit den gewöhnlichen identisch; bei der dritten wird statt um die körperfeste z' -Achse um die x' -Achse gedreht.

Für kleine Winkel drehen wir symmetrisch um alle drei Koordinatenachsen. Die Koordinaten $\bar{X}$ transformieren sich hierbei linear in den $\mathcal{F}_j$ (Anhang D) :

$$\begin{aligned} x' &= \bar{x} - \bar{X} + \bar{\mathcal{F}}_z (\bar{y} - \bar{Y}) - \bar{\mathcal{F}}_y (\bar{z} - \bar{Z}) \\ y' &= \bar{y} - \bar{Y} + \bar{\mathcal{F}}_x (\bar{z} - \bar{Z}) - \bar{\mathcal{F}}_z (\bar{x} - \bar{X}) \\ z' &= \bar{z} - \bar{Z} + \bar{\mathcal{F}}_y (\bar{x} - \bar{X}) - \bar{\mathcal{F}}_x (\bar{y} - \bar{Y}) \end{aligned} \quad (139)$$

Mit Hilfe dieser Transformation lösen wir nun die Deviationsmomente iterativ nach den Drehwinkeln auf. Der Schwerpunktsanteil ist vernachlässigbar, da $\bar{\mathcal{F}}$ selbst ein kleiner Winkel ist.

$$\bar{\mathcal{F}}_z = \frac{I_{xy}}{I_x - I_y} + \dots \quad \text{analog } \bar{\mathcal{F}}_x, \bar{\mathcal{F}}_y \quad (140)$$

mit $I_{xy} = \sum \bar{x}_i \cdot \bar{y}_i$ und $I_x = \sum \bar{x}_i^2$ (141)

$\bar{\mathcal{F}}$ bleibt klein, wenn die Deviationsmomente im Hilfssystem näherungsweise verschwinden. Auch müssen sich die Trägheitsmomente wesentlich unterscheiden. Um eine Achse mit Rotationssymmetrie verliert die Definition der Euler-Winkel ihren Sinn; denn eine kleine Änderung in wenigen Teilchenkoordinaten ruft große Winkelschwankungen hervor.

3.2 2 Die Hamiltonfunktion der spuriösen Rotation

Die willkürliche Rotationshamiltonfunktion (124), die wir zum Projizieren spurioser Zustände ansetzen, darf nur von den Eulerschen Winkeln $\bar{\varphi}_j$ abhängen. Als allereinfachste Möglichkeit wählen wir die Form:

$$H'_{\text{rot}}(\bar{\varphi}_j) = \frac{\lambda}{2} (\bar{J}^2 + \Omega_x^2 \bar{\varphi}_x^2 + \Omega_y^2 \bar{\varphi}_y^2 + \Omega_z^2 \bar{\varphi}_z^2), \quad (142)$$

wobei λ und Ω freie Konstanten sind.

Die kinetische Energie wird mit dem Drehimpulsoperator $\bar{J}$ berechnet, in den nur Eulersche Winkel eingehen. Für kleine Winkel finden wir mit Anhang D:

$$\bar{J}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{\varphi}_x} \quad \text{analog } \bar{J}_y, \bar{J}_z \quad (143)$$

$$\text{bzw. } \bar{J}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \bar{\varphi}_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \bar{\varphi}_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial \bar{\varphi}_z^2} \right\} \quad (144)$$

Wir schränken die spuriösen Rotationen mit einem quadratischen Potential auf kleine Winkelbereiche um $\bar{\varphi}_j = 0$ ein. Damit hat H'_{rot} dieselbe Form wie ein dreidimensionaler Oszillator. Das körperfeste System führt im Hilfssystem Drehschwingungen um die Gleichgewichtslage $\bar{\varphi}_j = 0$ aus. Wir sprechen von spuriösen Rotations - Oszillationen. Die Frequenzen der Schwingung ergeben sich nach unserem Ansatz zu:

$$\lambda \Omega_x, \lambda \Omega_y, \lambda \Omega_z \quad (145)$$

Da wir alle Rechnungen mit den Koordinaten $\bar{r}_i$ im Hilfssystem durchführen, wollen wir H'_{rot} in Teilchenkoordinaten übersetzen: Hierzu nehmen wir für $\bar{J}^2$ den gewöhnlichen Drehimpuls - Operator im Hilfssystem und für die Winkel $\bar{\varphi}_j$ die im vorhergehenden Abschnitt aufgestellten Beziehungen:

$$H'_{\text{rot}}(\bar{r}_i) = \frac{\lambda}{2} \left(\bar{J}^2 + \mathcal{J}_x^2 \frac{\bar{I}_{\bar{y}\bar{z}}^2}{(\bar{I}_{\bar{y}} - \bar{I}_{\bar{z}})^2} + \mathcal{J}_y^2 \frac{\bar{I}_{\bar{z}\bar{x}}^2}{(\bar{I}_{\bar{z}} - \bar{I}_{\bar{x}})^2} + \mathcal{J}_z^2 \frac{\bar{I}_{\bar{x}\bar{y}}^2}{(\bar{I}_{\bar{x}} - \bar{I}_{\bar{y}})^2} \right)$$

mit (146)

$$\mathcal{J}_{\bar{x}} = \frac{\hbar}{i} \left\{ \sum_i (\bar{Y}_i - \frac{1}{A} \sum \bar{Y}_i) \frac{\partial}{\partial \bar{Z}_i} - (\bar{Z}_i - \frac{1}{A} \sum \bar{Z}_i) \frac{\partial}{\partial \bar{Y}_i} + \sum_i S_i \bar{x} \right\}$$

(147)

entsprechend $\mathcal{J}_{\bar{y}}, \mathcal{J}_{\bar{z}}$

Es ist mit der Gleichung für $\bar{\mathcal{J}}_j$, (140), konsistent, auch im Drehimpuls alle Schwerpunktsanteile zu vernachlässigen. H'_{rot} kann beliebig genau in die Koordinaten $\bar{r}_i$ übertragen werden. Wir müssen nur die Entwicklung für $\bar{\mathcal{J}}_j$ nach den Koordinaten $\bar{r}_i$ weitertreiben.

3.2 3 Die intrinsische Hamiltonfunktion

Die intrinsische Hamiltonfunktion

$$H_{\text{intr}}(\mathcal{C}_S) \varphi_i(\mathcal{C}_S) = \epsilon_i \varphi_i(\mathcal{C}_S) \quad (148)$$

entsteht aus der Gesamthamiltonfunktion, wenn wir den Operator der Schwerpunkts- und Rotationsenergie abziehen:

$$H_{\text{intr}}(\mathcal{C}_S) = \sum_i T_i - \frac{P^2}{2AM} - \frac{1}{2} \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (\mathcal{J} - \mathcal{J}')^2_A + \sum_{i < j} V_{ij} R$$

(149)

Hintr. hängt ausschließlich von inneren Koordinaten ab. Da auch in dem Term $\mathcal{J}'^2/\Theta_A$ nur innere Koordinaten vorkommen, könnte dieser Operator zur intrinsischen Energie hinzugezählt werden. Wir rechnen ihn aber sinngemäß zur Rotationsenergie. Dies zeigt, daß die Definition von Hintr. in gewisser Weise

willkürlich ist.

Wir übersetzen Hintr. in die Laborkoordinaten $\bar{r}_i$:

Mit Hilfe der in Abschnitt 2.4 gefundenen Beziehung (86)

$$\begin{aligned} \frac{M}{\Theta_C} (J - J')^2_C &= \frac{1}{I_A + I_B} \left(\sum_{i,\alpha} (X'_{iA} R_{B\alpha} + X'_{iB} R_{A\alpha}) p_{i\alpha} \right)^2 \\ &= \frac{-\hbar^2}{\sum_{i,\alpha,\beta} (R_{A\alpha}^{(\bar{\varphi})} R_{A\beta}^{(\bar{\varphi})} + R_{B\alpha}^{(\bar{\varphi})} R_{B\beta}^{(\bar{\varphi})}) (\bar{X}_{i\alpha} - \bar{X}_\alpha)(\bar{X}_{i\beta} - \bar{X}_\beta)} \\ &\quad \cdot \left\{ \sum_{i,\alpha,\beta} R_{A\alpha}^{(\bar{\varphi})} R_{B\beta}^{(\bar{\varphi})} (\bar{X}_{i\alpha} - \bar{X}_\alpha) \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\beta}} + (\bar{X}_{i\beta} - \bar{X}_\beta) \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\alpha}} \right\}^2 \end{aligned} \quad (150)$$

berechnet sich der Näherungsausdruck

$$\begin{aligned} H_{\text{intr}} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\sum_{i,\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \bar{X}_{i\alpha}^2} - \frac{1}{A} \sum_{\alpha} \left(\sum_i \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\alpha}} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha < \beta} \frac{1}{I_\alpha + I_\beta} \left\{ \sum_i \bar{X}_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\beta}} + \bar{X}_{i\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\alpha}} \right\}^2 \right] + \sum_{i < k} V_{ik}. \end{aligned} \quad (151)$$

Wir haben in Hintr. kleine Rotationswinkel angenommen: $R_{A\alpha}(\bar{\varphi}_j) \approx \delta_{\alpha\alpha}$ und die Schwerpunktskoordinaten vernachlässigt: $\bar{X}_{i\alpha} \gg \bar{X}_\alpha$. Sollte es sich als nötig erweisen, so können diese Vernachlässigungen jederzeit korrigiert werden: Wir brauchen nur die Entwicklung (140) der Winkel $\bar{\varphi}_j$ nach den Koordinaten $\bar{X}_{i\alpha}$ einzusetzen und auch die Schwerpunktskoordinaten mitzunehmen.

Mit den erwähnten Approximationen hat das Rotationsglied in Hintr. formal die gleiche Gestalt, wie wenn wir mit den körperfesten Koordinaten X'_{iA} rechnen würden. Der kleine Unterschied in den Koordinaten und Trägheitsmomenten zwischen körperfestem System und Hilfssystem ist der Amplitude proportional, mit der

die Rotationsoszillationen schwingen. Die Differenz kann prinzipiell beliebig klein werden, wenn man stärkere Rückstellkräfte in H'_{rot} wählt.

In dem subtrahierten Rotationsglied steht der Operator

$$N_x = \sum_i Y_i P_{z_i} + Z_i P_{y_i} \quad \text{analog } N_y, N_z, \quad (152)$$

dessen Eigenschaften z.B. von Nataf⁴ angegeben werden. Der Operator N unterscheidet sich vom gewöhnlichen Drehimpuls durch das Plus-Zeichen. Seine Vertauschungsregeln sind mit den Drehimpulsoperatoren verknüpft:

$$[N_x, N_y] = i\hbar L_z, [N_y, N_z] = i\hbar L_x \quad (153)$$

$$\text{und } [N_z, N_x] = i\hbar L_y.$$

3.2 4 Die Projektion spurioser Zustände

Um die Wellenfunktion $\varphi_i(\mathcal{C}_\sigma)$ der intrinsischen Hamiltonfunktion in den Koordinaten $\bar{r}_i$ zu berechnen, führen wir eine neue Hamiltonfunktion ein, die die gleichen intrinsischen Zustände ungestört enthält:

$$\bar{H} = H_{\text{intr}}(\mathcal{C}_\sigma) + H_{\text{CM}}(\bar{X}) + H'_{\text{rot}}(\bar{\mathcal{V}}_j) \quad (154)$$

$$\text{mit } H_{\text{CM}} = \frac{P^2}{2AM} + W(\bar{X}) \quad (155)$$

Alle drei Anteile in $\bar{H}$ vertauschen mit $\bar{H}$ und untereinander. Daher können auch alle Hamiltonfunktionen gleichzeitig mit $\bar{H}$ diagonalisiert

werden; d.h. die Wellenfunktionen lassen sich in die drei Koordinatentypen aufspalten.

Eine Wellenfunktion in den Koordinaten $\bar{r}_i$ separiert in die inneren Koordinaten $\zeta_\sigma, \bar{X}$ und $\bar{\mathcal{Y}}$

$$\phi_k(\bar{r}_i) = \varphi_i(\zeta_\sigma) \cdot \Delta_\alpha(\bar{X}) \cdot d_\beta(\bar{\mathcal{Y}}_j) , \quad (156)$$

wenn sie gleichzeitig in den drei Hamiltonfunktionen diagonal ist,

$$\begin{aligned} \bar{H}(\bar{r}_i) \phi_k(\bar{r}_i) &= \bar{E}_k \phi_k(\bar{r}_i) \quad k = 0, 1, 2 \dots \\ H_{CM}(\bar{r}_i) \phi_k(\bar{r}_i) &= S_\alpha \phi_k(\bar{r}_i) \quad \alpha = 0, 1, 2 \dots \\ H'_{rot}(\bar{r}_i) \phi_k(\bar{r}_i) &= R_\beta \phi_k(\bar{r}_i) \quad \beta = 0, 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (157)$$

und wenn die Eigenwerte S_α und R_β nicht entartet sind. Die Grundzustände der spuriosen Rotation und Schwerpunktsbewegung haben keine Energie-Entartung. Wir finden daher eine Klasse separabler Funktionen, in der alle intrinsischen Zustände nur einmal auftreten, wenn wir uns auf die Zustände beschränken, die die spuriose Bewegung im Grundzustand enthalten. Wir identifizieren diese Zustände an ihrer Energie nach Gl. (157) .

$$\phi_i(\bar{r}_i) = \varphi_i(\zeta_\sigma) \cdot \Delta_0(\bar{X}) \cdot d_0(\bar{\mathcal{Y}}_j) \quad (158)$$

Ohne auf innere Koordinaten ζ_σ transformieren zu müssen, haben wir damit Funktionen ϕ_i bestimmt, die alle Eigenschaften der intrinsischen Wellenfunktionen in den Koordinaten $\bar{r}_i$ angeben.

Der Vollständigkeit halber stellen wir die zu diagonalisierenden Hamiltonfunktionen zusammen:

Um die intrinsische Wellenfunktion zu berechnen, müssen die folgenden Hamiltonoperatoren diagonalisiert werden:

$$\bar{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \sum_{i,\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \bar{X}_{i\alpha}^2} - \sum_{\alpha < \beta} \frac{1}{I_{\alpha} + I_{\beta}} N_{\alpha\beta}^2 \right\} + \frac{\lambda}{2} \left\{ \bar{J}^2 + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha}^2 \bar{J}_{\alpha}^2 \right\} + \sum_{i < k} V_{ik}(\bar{r}_i) + W\left(\frac{1}{A} \sum \bar{r}_i\right) \quad (159)$$

$$H_{CM} = -\frac{\hbar^2}{2AM} \sum_{\alpha} \left(\sum_i \frac{\partial}{\partial \bar{X}_{i\alpha}} \right)^2 + W\left(\frac{1}{A} \sum \bar{r}_i\right) \quad (160)$$

$$H'_{rot} = \frac{\lambda}{2} \left\{ \bar{J}^2 + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha}^2 \bar{J}_{\alpha}^2 \right\} \quad (161)$$

mit den Abkürzungen

$$\bar{J}_{\bar{X}} = \frac{\hbar}{i} \sum_i \bar{Y}_i \frac{\partial}{\partial \bar{Z}_i} - \bar{Z}_i \frac{\partial}{\partial \bar{Y}_i} + \sum_i S_{i\bar{X}} \quad \text{analog} \quad \bar{J}_{\bar{Y}}, \bar{J}_{\bar{Z}} \quad (162)$$

$$N_{\bar{X}\bar{Y}} = \frac{\hbar}{i} \sum_i \bar{X}_i \frac{\partial}{\partial \bar{Y}_i} + \bar{Y}_i \frac{\partial}{\partial \bar{X}_i} \quad (163)$$

$$\text{und} \quad \bar{J}_{\bar{X}} = \frac{I_{\bar{Y}\bar{Z}}}{I_{\bar{Y}} - I_{\bar{Z}}} \quad , \quad I_{\bar{X}} = \sum \bar{X}_i^2, \quad I_{\bar{X}\bar{Y}} = \sum_i \bar{X}_i \bar{Y}_i \quad (164)$$

3.2 5 Die Diagonalisierung der Rotationsenergie

Die Funktionen $\phi_i(\vec{r}_i)$ in (158) bilden ein vollständiges Ersatzsystem für die inneren Wellenfunktionen $\varphi_i(\xi_e)$. Mit ihnen und den Kreiselfunktionen haben wir eine Basis

$$D_{MK}^I(\mathcal{J}_J) \cdot \phi_i(\vec{r}_i), \quad (165)$$

um die Rotationsenergie der Hamiltonfunktion anschließend zu diagonalisieren.

$$T_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (J - J')_A^2 \quad (166)$$

Der Drehimpulsoperator J wirkt nur auf die kollektiven Euler Winkel $\mathcal{J}_J$ in den Kreiselfunktionen. Diese Winkel dürfen nicht mit den anderen Eulerschen Winkeln $\bar{\mathcal{J}}_J$ verwechselt werden, die die Lage des körperfesten Systems bezüglich des Hilfssystems angeben und die durch unseren speziellen Ansatz für H'_{rot} auf kleine Winkel beschränkt sind.

Trotz hängt außer von den kollektiven Winkeln $\mathcal{J}_J$ nur noch von den inneren Koordinaten ξ_e ab. Berechnen wir die von ξ_e abhängigen Matrixelemente mit den Wellenfunktionen $\phi_i(\vec{r}_i)$, so integriert sich die spuriose Rotations- und Schwerpunktsoszillation heraus; denn die Matrixelemente sind unabhängig von $\bar{\mathcal{J}}_J$ und $\bar{X}$, und die Wellenfunktionen zerfallen in den intrinsischen Koordinaten in Produktfunktionen, die alle die gleiche spuriose Anregung enthalten. Freilich sieht man diese Separation, die in (158) aufgeschrieben ist, nie explizit; denn alle Rechnungen werden ja in den Koordinaten $\vec{r}_i$ durchgeführt. Dadurch haben wir uns die komplizierten Transformationen

auf innere Koordinaten erspart.

Um die Matrixelemente in ζ_σ mit den Ersatzfunktionen $\phi_i(\vec{r}_i)$ auszuwerten, müssen wir noch die von ζ_σ abhängigen Anteile in die Koordinaten $\vec{r}_i$ übertragen.

Nach Abschnitt 2.4 gilt:

$$J'_A = \frac{2}{I_B + I_C} \sum_{i,\alpha} (I_C X'_{iB} R_{\alpha} - I_B X'_{iC} R_{B\alpha}) p_{i,\alpha} + \sum_{i,\alpha} R_{A\alpha} S_{i,\alpha} \quad (167)$$

$$\text{und} \quad \Theta_A = M \frac{(I_B - I_C)^2}{I_B + I_C} \quad (168)$$

Unter Beschränkung auf kleine Winkel $\bar{\vartheta}_j$ können wir näherungsweise $R_{A\alpha} = \delta_{A\alpha}$ setzen und erhalten:

$$J'_{X'} = \frac{\hbar}{i} \frac{2}{I_{\bar{Y}} + I_{\bar{Z}}} \sum_{i,\alpha} (I_{\bar{Z}} \bar{Y}_i \frac{\partial}{\partial \bar{Z}_i} - I_{\bar{Y}} \bar{Z}_i \frac{\partial}{\partial \bar{Y}_i}) + \sum_i S_{i\bar{X}} \quad (169)$$

$$\text{und} \quad \Theta_{X'} \simeq \Theta_{\bar{X}} = M \frac{(I_{\bar{Y}} - I_{\bar{Z}})^2}{I_{\bar{Y}} + I_{\bar{Z}}} \quad (170)$$

Die Näherung $R_{A\alpha} = \delta_{A\alpha}$ in den Differenzdrücken

$$\begin{aligned} I_A - I_B = \\ \sum_{i,\alpha,\beta} (R_{A\alpha}(\bar{\vartheta}_j) R_{A\beta}(\bar{\vartheta}_j) - R_{B\alpha}(\bar{\vartheta}_j) R_{B\beta}(\bar{\vartheta}_j)) (\bar{X}_{i\alpha} - \bar{X}_{i\beta}) (\bar{X}_{i\beta} - \bar{X}_{i\alpha}) \end{aligned} \quad (171)$$

kann möglicherweise in einer konkreten Rechnung schlecht sein. Die Differenzen sind die Quadrupelmomente Q' im körperfesten System. Schwingt das körperfeste System im Hilfssystem weit aus, so mißt man im Hilfssystem ein kleineres Quadrupolmoment $\bar{Q}$. Wir finden zum Beispiel:

$$\begin{aligned} \bar{Q} &= 2 I_{\bar{Z}} - I_{\bar{X}} - I_{\bar{Y}} \\ &= (I_{Z'} - I_{X'}) (1 - 3 \bar{\vartheta}_Y^2) + (I_{Z'} - I_{Y'}) (1 - 3 \bar{\vartheta}_X^2) \end{aligned} \quad (172)$$

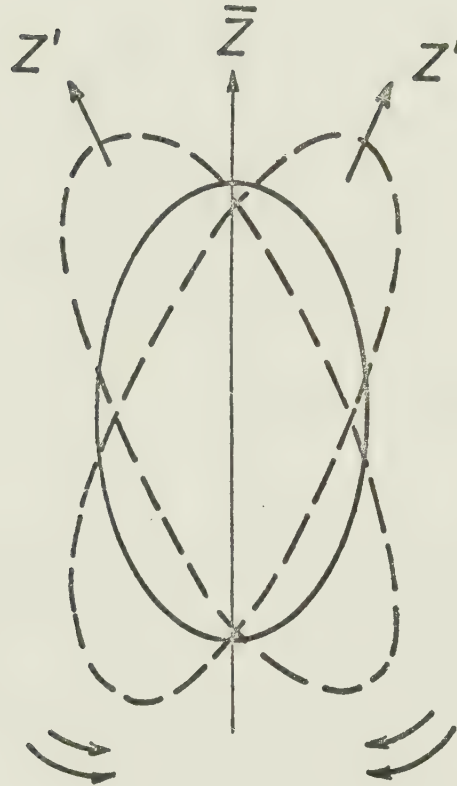


Fig.2 Quadrupolmoment im Hilfssystem (—) und im körperfesten System (---; in 2 verschiedenen Positionen)

Das Trägheitsmoment $\Theta_{\bar{x}}$ (170) des Hilfssystems gibt daher einen zu kleinen Wert für das körperfeste Trägheitsmoment $\Theta_{x'}$ an. Das körperfeste Trägheitsmoment liegt über dem hydrodynamischen Wert des Hilfssystems. Da die Trägheitsmomente wesentlich in die Rotationsspektren eingehen, müssen wir diese Abweichungen, wenn nötig, korrigieren. Eine bessere Näherung für $\Theta_{x'}$ findet sich, wenn wir $R_{A\alpha}$ in den obigen Differenzen nach $\bar{v}_j$ entwickeln. Wir vermerken ausdrücklich, daß der Wert der körperfesten Trägheitsmomente nicht davon abhängt, mit welcher Amplitude die spuriöse Rotation schwingt.

3.3 Das Nilssonmodell im Hilfssystem

Bisher dachten wir an Zwei-Teilchen-Potentiale, die vom relativen Abstand der Nukleonen abhängen und sowohl translations- wie rotationsinvariant sind. Da es für deformierte Kerne sinnvoll ist, von einem deformierten mittleren Potential auszugehen, machen wir den einfachsten möglichen Ansatz in den abhängigen intrinsischen Koordinaten.

$$V = \frac{M}{2} \sum_i \omega_x^2 x_i'^2 + \omega_y^2 y_i'^2 + \omega_z^2 z_i'^2 \text{ mit } x' = x'(\varphi) \quad (173)$$

Wir verwenden V als mittleres Potential im halbmikroskopischen Modell. Das Potential ist nicht rotations- und translationsinvariant; denn es enthält implizit als Variablen nur die inneren Koordinaten φ . Es darf aber nicht als ein mittleres Potential im üblichen Sinne aufgefaßt werden, da die Koordinaten x' abhängig sind. Transformiert man V (173) in die Laborkoordinaten, so entstehen Vielteilchen-Potentiale.

Wir berechnen die Gestalt von V im Hilfssystem mit den Transformationen aus 3.2 1 (139).

$$\begin{aligned} V = \frac{M}{2} & (\omega_x^2 I_{\bar{x}} + \omega_y^2 I_{\bar{y}} + \omega_z^2 I_{\bar{z}} \\ & - \omega_x^2 A \bar{X}^2 - \omega_y^2 A \bar{Y}^2 - \omega_z^2 A \bar{Z}^2 \\ & + (\omega_x^2 - \omega_y^2) \frac{I_{\bar{x}\bar{y}}^2}{I_{\bar{x}} - I_{\bar{y}}} + (\omega_y^2 - \omega_z^2) \frac{I_{\bar{y}\bar{z}}^2}{I_{\bar{y}} - I_{\bar{z}}} + (\omega_z^2 - \omega_x^2) \frac{I_{\bar{z}\bar{x}}^2}{I_{\bar{z}} - I_{\bar{x}}}) \end{aligned} \quad (174)$$

Aus diesem Ergebnis läßt sich ablesen, daß ein dreidimensionaler Oszillator im Hilfssystem

$$\bar{V} = \frac{M}{2} \sum_i \omega_x^2 \bar{x}_i^2 + \omega_y^2 \bar{y}_i^2 + \omega_z^2 \bar{z}_i^2 \quad (175)$$

außer dem intrinsischen Oszillator zwei weitere Potentiale enthält:

Je ein Potential für die Schwerpunktsbewegung

$$\frac{AM}{2} \sum_A \omega_A^2 X_A^2 \quad (176)$$

und für die Rotationsoszillationen

$$\frac{M}{2} \sum_{A < B} (\omega_A^2 - \omega_B^2) (I_B - I_A) \bar{\mathcal{J}}_{AB}^2 \quad (177)$$

Der Vorfaktor vor $\bar{\mathcal{J}}^2$ ist im allgemeinen positiv, da die Relation gilt:

$$I_A > I_B, \text{ wenn } \omega_A < \omega_B. \quad (178)$$

Im Nilssonmodell⁹ glaubt man, man hätte das Oszillatorpotential im körperfesten System aufgeschrieben. Das ist nicht wahr. In Wirklichkeit rechnet man in einem Laborsystem; denn es bleibt unberücksichtigt, daß die körperfesten Koordinaten voneinander abhängen. Auch wird die volle kinetische Energie des A-Teilchensystems angesetzt. Wir werden zeigen, daß das Nilssonmodell in einem Hilffssystem aufgeschrieben ist, das um kleine Winkel gegen das körperfeste System gedreht ist.

Das Nilssonpotential steht fest im Raum. Die Wellenfunktion hat näherungsweise die gleiche Deformation wie das Potential. Drehen wir das Teilchensystem kollektiv aus der Stellung heraus, in der seine Ausdehnung optimal mit dem Potentialverlauf übereinstimmt, so muß Energie aufgewandt werden; denn dann harmonisieren Teilchenausdehnung und Potential schlechter. Es treten Rückstellkräfte auf, die zu Rotationsoszillationen führen.

Vielteilchen - Wellenfunktionen, die mit Nilssonfunktionen gebildet werden, enthalten somit neben

der spuriosen Schwerpunktsbewegung spuriose Rotationsoszillationen.

Um die Frequenz dieser Oszillationen zu bestimmen, transformieren wir das Nilssonmodell auf intrinsische Koordinaten (ohne $\mathcal{L}^2$ und $\mathcal{L}S$ -Term, kleine Winkel ϑ_j).

$$\begin{aligned} & \sum_{i, \alpha} \frac{p_{i\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i, \alpha} \omega_{\alpha}^2 X_{i\alpha}^2 \\ &= \frac{p^2}{2AM} + \frac{AM}{2} \sum_A (\omega_A X_A)^2 + T_{\text{intr}}(\vartheta) + \frac{M}{2} \sum_{iA} (\omega_A X_{iA})^2 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_A \frac{1}{\Theta_A} (J - J_A)^2 + \frac{M}{2} \sum_{A < B} (\omega_A^2 - \omega_B^2) (\bar{I}_B - \bar{I}_A) \vartheta_{AB}^2 \quad (179) \end{aligned}$$

Wie Rechnungen in deformierten Kernen zeigen, variieren die Trägheitsmomente I_A nur wenig von Zustand zu Zustand; wir können sie daher in guter Näherung durch den Erwartungswert $\bar{I}_A$ ersetzen. Weiterhin nehmen wir vorübergehend an, daß die inneren Drehimpulse J' der intrinsischen Wellenfunktion klein seien. Dann bleibt für die Rotationsoszillationen die Hamiltonfunktion H' rot übrig:

$$\begin{aligned} H'_{\text{rot}} &= \frac{\lambda_x}{2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial J_x^2} + R_x^2 \nu_x^2 \right) + \frac{\lambda_y}{2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial J_y^2} + R_y^2 \nu_y^2 \right) \\ &+ \frac{\lambda_z}{2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial J_z^2} + R_z^2 \nu_z^2 \right) \quad (180) \end{aligned}$$

mit den Konstanten

$$\lambda_x = \frac{1}{\Theta_x}, \quad R_x^2 = M \bar{\Theta}_x (\omega_y^2 - \omega_z^2) (\bar{I}_z - \bar{I}_y) \quad (181)$$

H'_{rot} hat die Frequenzen

$$\hbar \tilde{\omega}_x = \hbar \lambda_x R_x = \hbar \sqrt{(\omega_y^2 - \omega_z^2) \frac{\bar{I}_z + \bar{I}_y}{\bar{I}_z - \bar{I}_y}} \quad (182)$$

analog $\tilde{\omega}_y, \tilde{\omega}_z$

Setzen wir die Parameter des Nilssonmodells, Gl.(44), in $\hbar\tilde{\omega}$ ein,

$$\omega_y^2 - \omega_z^2 = \omega_x^2 - \omega_z^2 = 2\delta\omega_0^2 \quad (183)$$

$$\text{und } \bar{I}_z - \bar{I}_x \approx \delta(\bar{I}_z + \bar{I}_x) \approx \frac{2}{5}\delta AR_0^2, \quad (184)$$

so ergibt sich näherungsweise ($\delta < 0.3$):

$$\hbar\tilde{\omega}_x \approx \hbar\tilde{\omega}_y \approx \sqrt{2} \hbar\omega_0 \quad (185)$$

$\hbar\tilde{\omega}_z$ bleibt wegen der Rotationssymmetrie des Potentials um die z - Achse unbestimmt. Die Anregungsenergien der Rotations - Oszillationen sind etwa gleich groß wie die der Nukleonen und unterscheiden sich daher wesentlich von den üblichen Rotationsenergien. In der gleichen Größenordnung wie $\hbar\tilde{\omega}$ liegen die Energien der spuriosen Schwerpunktsbewegung. Wir erwarten deshalb, daß sich unter den Zuständen, die mit Vielteilchen-Wellenfunktionen des Nilssonmodells gefunden werden, etwa gleichviel niederenergetische spuriose Rotationszustände wie spuriose Schwerpunktszustände verbergen.

Für den Grundzustand der Rotationsoszillationen können mit den obigen Approximationen folgende Größen angegeben werden:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | 0 \rangle &= \frac{\hbar\tilde{\omega}_x}{2\lambda_x} + \frac{\hbar\tilde{\omega}_y}{2\lambda_y} \approx \hbar^2 \frac{2\sqrt{2}}{5} \cdot \frac{AR_0^2}{\hbar/M\omega_0} \delta^2 \\ \langle 0 | \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 | 0 \rangle &= \frac{\hbar}{2R_x} + \frac{\hbar}{2R_y} \\ &\approx \frac{5}{2\sqrt{2}} \frac{\hbar/M\omega_0}{AR_0^2} \delta^{-2} \end{aligned} \quad (186)$$

Die Schwingungsamplitude nimmt mit wachsendem A ab, da die effektive Oszillatormasse anwächst. Mit den üblichen Werten für $R_0 = 1, 2 \cdot A^{1/3} \text{ fm}$ und

$$\hbar \omega_0 = 41/A^{1/3} \text{ MeV}$$

berechnet sich

$$\langle 0 | \vartheta_x^2 | 0 \rangle = \langle 0 | \vartheta_y^2 | 0 \rangle \approx \frac{0.6}{A^{4/3} \cdot \delta^2} \quad (187)$$

Für Ne^{20} finden wir für $\delta = 0.4$: $\vartheta^2 = 0.07 \triangleq (15^\circ)^2$

Zur Kontrolle geben wir diesen mittleren Winkel direkt durch die entsprechenden Erwartungswerte an:

$$\frac{\overline{I_{2x}^2}}{(\overline{I_z} - \overline{I_x})^2} = \frac{16}{430} = 0.04 \triangleq (11^\circ)^2 \quad (188)$$

Auch für ϑ_z^2 bestimmt sich ein relativ kleiner Winkel:

$$\langle |\vartheta_z^2| \rangle = \frac{\overline{I_{xy}^2}}{(\overline{I_x} - \overline{I_y})^2} = \frac{5}{20} = 0.25 \triangleq (29^\circ)^2 \quad (189)$$

Nach der Heisenbergschen Unschärferelation entsprechen kleine Drehwinkel einer großen Unschärfe im Drehimpuls. Die hohen Drehimpulswerte der Vielteilchen - Wellenfunktionen des Nilssonmodells lassen sich damit verstehen: Sie repräsentieren die kinetische Energie der spuriosen Rotationsoszillationen.

Interpretieren wir kollektive Rotationsoszillationen in die Vielteilchen - Wellenfunktionen, so hat das nur Sinn, wenn diese Zustände näherungsweise von der intrinsischen Bewegung entkoppelt sind. Dies ist für kleine Deformationen nicht erfüllt. In Kernen mit kleinen Deformationen genügt bereits die

Anregung weniger Nukleonen, um wesentlich andere Quadrupolmomente zu erzeugen. Wir setzen für die Trennung beider Bewegungstypen daher voraus, daß die Quadrupolmomente der Wellenfunktionen nicht stark von Zustand zu Zustand schwanken; d.h. die Trägheitsmomente sollten wie im Rot.- Vib.- Modell um eine mittlere Deformation β_0 entwickelbar sein.

In der Regel wird man Vielteilchen - Wellenfunktionen des Nilssonmodells als Basisfunktionen verwenden, um das halbmikroskopische Modell zu lösen. Solche Wellenfunktionen enthalten Schwerpunkts- und Rotationsoszillationen. Wir wählen daher für die beiden Projektions - Hamiltonfunktionen H_{CM} und H'_{rot} ähnliche Potentiale, wie sie bereits angenähert im Oszillator des Nilssonmodells stecken; dann genügt eine relativ kleine Zahl von Basisfunktionen, um spuriose Zustände herauszuprojizieren. Addieren wir bei dieser Wahl das körperfeste Potential V sowie Schwerpunkts- und Rotationspotential, so finden wir näherungsweise den Oszillator $\bar{V}$, d.h. das Nilssonpotential (ohne l - und l^2 - Term), aufgeschrieben im Hilfssystem.

IV. Ergebnis und Ausblick

Projizieren wir spuriose Zustände aus Vielteilchen-Wellenfunktionen, so erhalten wir gleiche Ergebnisse, wie wenn wir auf unabhängige innere Koordinaten transformiert hätten. Die Projektion spurioser Zustände ist nämlich einer Transformation auf innere Koordinaten vollkommen gleichwertig. Wir berechnen daher die kinetische Energie des halbmikroskopischen Modells im Prinzip exakt, ohne innere Koordinaten zu gebrauchen. Unsere Methode unterscheidet sich ganz wesentlich von den üblichen Verfahren, die redundante Variablen verwenden. In diesen Verfahren weiß man nicht, wie der störende Einfluß der überflüssigen Koordinaten exakt eliminiert werden kann.

Unsere Methode hat den Nutzen, daß wir die kinetische Energie in der gleichen Weise in einen intrinsischen Anteil und einen Rotationsanteil aufspalten, wie es sich aus einer Transformation auf innere Koordinaten ergäbe. Auch können wir alle inneren Größen des körperfesten Systems, wie zum Beispiel innere Drehimpulse und Trägheitsmomente, bestimmen. Wir müssen daher nicht die Trägheitsmomente mit dem Cranking-Modell von Inglis¹⁵ berechnen, was sonst in halbmikroskopischen Theorien üblich ist.

Im Anschluß an diese Arbeit soll die Theorie auf die intrinsischen Zustände von Ne^{20} angewendet werden. Bisher haben wir das halbmikroskopische Modell für Ne^{20} nur unter der Annahme berechnet, daß wir die intrinsischen Koordinaten als unabhängig betrachten dürfen. Es zeigen sich Inkonsistenzen mit dem experimentellen Spektrum. Insbesondere liegen zuviele "intrinsische" Zustände im Niederenergiebereich. Während sich ein Teil der Zustände bereits als

spuriöse Schwerpunkts-Zustände identifizieren ließ, fehlen noch einige Programme, um auch die spuriösen Rotationen herauszuprojizieren.

Gewöhnlich benutzt man Paarkräfte, um ungepaarte Teilchenanregungen energetisch anzuheben. Man erreicht so eine geringere Niveaudichte im Niederenergie-Bereich. Es ist daher sehr aufschlußreich, zu fragen, ob Paarkräfte hierfür noch notwendig sind, wenn die spuriöse Rotation herausprojiziert wird.

Wir haben uns in dieser Arbeit mit deformierten Kernen beschäftigt. Es wäre sehr anregend, die gleiche Theorie auf Quadrupol-Schwingungen in sphärischen Kernen zu übertragen. Statt der Rotations-Koordinaten hätte man die Quadrupolmomente als Kollektiv-Koordinaten zu verwenden. Diese Methode wird dann vorteilhaft sein, wenn man sie auf Kerne anwendet, die als gute Vibratoren bekannt sind. In allen anderen sphärischen Kernen ist es natürlich am einfachsten, die kinetische Energie in der gewöhnlichen Form zu berechnen.

Zusammenfassung:

Es wird eine Methode entwickelt, spuriose Zustände aus Vielteilchen-Wellenfunktionen zu projizieren. Wir wenden das Verfahren auf die spuriose Schwerpunktsbewegung und spuriose Rotationen an.

Die spuriose Schwerpunktsbewegung läßt sich wie folgt eliminieren: Man addiert zu einer translationsinvarianten Hamiltonfunktion ein Potential in den Schwerpunktskoordinaten. Ein solches Potential beeinflußt nicht die inneren Zustände des Systems, bindet aber den Schwerpunkt. Da Schwerpunktsanteil und innerer Anteil der neuen Hamiltonfunktion separieren, bzw. kommutieren, kann man Wellenfunktionen in den Laborkoordinaten finden, die sowohl die gesamte Hamiltonfunktion wie die Schwerpunktshamiltonfunktion gleichzeitig diagonalisieren. Die Wellenfunktionen enthalten dann eine definierte Schwerpunktsbewegung. Alle Zustände, in denen die Schwerpunktsbewegung nicht im Grundzustand ist und die daher spuriös sind, werden an der Schwerpunktsenergie erkannt und ausgesondert. Zurück bleibt die Zustandsmenge, die den Schwerpunkt im Grundzustand enthält; sie umfaßt eindeutig alle inneren Zustände.

Das Verfahren kann für beliebige Einteilchenpotentiale benutzt werden. Man muß nur in solchen Potentialen die Teilchenkoordinate statt von einem fiktiven Koordinatenursprung vom Schwerpunkt aus rechnen.

Ferner wird ein halbmikroskopisches Modell für deformierte Kerne abgeleitet. Es beschreibt die Rotationen der deformierten Kerngestalt mit kollektiven Koordinaten, den Euler Winkel. Hingegen nicht kollektiv, sondern mikroskopisch

wird die Nukleonen-Bewegung innerhalb der deformierten Kerngestalt, d.h. im inneren oder körperfesten System behandelt. Das innere System läßt sich so festlegen, daß es in jedem Augenblick ein Haupt-Achsen-System für Trägheitsmomente ist. Ohne auf spezielle unabhängige innere Koordinaten transformieren zu müssen, werden die Eigenschaften der inneren Impulse und Drehimpulse mit Hilfe einer kanonischen Transformation bestimmt. Der Operator der kinetischen Energie spaltet auf in einen Rotationsterm, der die Drehung des Kerns im Raum und ihre Kopplung mit der inneren Bewegung beschreibt, und einen zweiten Ausdruck, der die Energie der Nukleonen bezüglich der körperfesten Achsen angibt. Man findet gleiche Trägheitsmomente wie im Rotations-Vibrations-Modell.

Die innere Bewegung wird mit den unabhängigen Koordinaten aller Nukleonen dargestellt. Da man dann für das körperfeste System zuviele Koordinaten, d.h. Freiheitsgrade gebraucht, sind in der Wellenfunktion neben der inneren Bewegung zusätzliche spuriose Rotationsfreiheitsgrade enthalten. Diese Freiheitsgrade werden wie im Schwerpunktsfall eliminiert: Man addiert zur Hamiltonfunktion einen Rotator, der definierte gebundene Zustände für die spuriose Rotation liefert. Damit ermittelt man Wellenfunktionen in den Teilchenkoordinaten, die alle den Rotator im Grundzustand enthalten. Die so berechneten Wellenfunktionen beschreiben eindeutig die inneren Anregungen in einem Laborsystem. In diesem System führt das körperfeste System unphysikalische Rotationsoszillationen aus, die nicht mit der inneren Bewegung verkoppelt sind. Die Amplitude dieser Schwingung bleibt auf kleine Drehwinkel durch die spezielle Form des Zusatz-Rotators beschränkt. Die physikalische Rotation des Vielteilchensystems wird, wie bereits erwähnt, mit kollektiven Euler Winkeln dargestellt.

Mit der Projektion spurioser Zustände hat man die Energie des Vielnukleonen-Systems genau so exakt berechnet, wie wenn man auf innere unabhängige Koordinaten transformiert hätte.

Die hydrodynamischen Trägheitsmomente

Wir transformieren die hydrodynamischen Trägheitsmomente, die wir bis zur vierten Ordnung in den Oberflächenkoordinaten entwickeln, auf die folgende Gestalt:

$$G_2 = \frac{(\bar{I}_x - \bar{I}_y)^2}{\bar{I}_x + \bar{I}_y} M \quad \text{mit} \quad \bar{I}_x = \int x^2 \rho_0 dV \quad \text{usw.} \quad (1)$$

und $\rho_0 = 3A/4\pi R_0^3$

Mit dem Ansatz für die Kernoberfläche im Laborsystem

$$R = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda=0, \mu}^2 \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) \right) \quad (2)$$

und unter den üblichen Voraussetzungen für die Dynamik eines Tropfens, Inkompressibilität und Wirbelfreiheit der Bewegung, berechnet sich die kinetische Energie bis Glieder in α^3 zu

$$T = \frac{M \rho_0 R_0^5}{4} \left\{ \sum_{\mu} |\dot{\alpha}_{2\mu}|^2 + 18 \sqrt{\frac{5^3}{4\pi}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\kappa, \mu, \nu} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \kappa & \mu & \nu \end{pmatrix} \alpha_{2\kappa} \dot{\alpha}_{2\mu} \dot{\alpha}_{2\nu} \right\} \quad (3)$$

Die intrinsische Oberfläche

$$R = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda=0, \mu}^2 a_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta', \varphi') \right) \quad (4)$$

wird so festgelegt, daß im körperfesten System die Deviationsmomente verschwinden

$$\begin{aligned}
 I_{2,1} &= I_{2,-1} = I_{2,2} - I_{2,-2} = 0 \\
 \text{mit } I_{2\mu} &= \int_0^R \rho_0 r^2 Y_{2\mu} dV \\
 &= \rho_0 R^5 \left\{ a_{2\mu}^* + \sqrt{\frac{5^3}{\pi}} \binom{222}{000} \sum_{\mu_1, \mu_2} (-)^{\mu} \binom{222}{\mu_1, \mu_2, -\mu} a_{2\mu_1} a_{2\mu_2}^* \right\}
 \end{aligned} \tag{5}$$

Es folgt für die Koordinaten $a_{2,1}, a_{2,-1}, a_{2,2} - a_{2,-2}$:

$$\begin{aligned}
 a_{2,\pm 1} &= -\sqrt{\frac{5^3}{\pi}} \binom{222}{000} \sum_{\mu_1, \mu_2} \binom{222}{\mu_1, \mu_2, \pm 1} a_{2\mu_1} a_{2\mu_2}^* + \dots \\
 &= 0 + [a^3]
 \end{aligned} \tag{6}$$

analog

$$a_{2,2} - a_{2,-2} = 0 + [a^3]$$

Die Transformation der kinetischen Energie auf das körperfeste System ergibt ($a_{20} = \beta \cos \gamma, a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma$):¹⁶

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \frac{F_k^2}{\Theta_k} + T_{\text{vib}}(\beta, \gamma, \dot{\beta}, \dot{\gamma}) \tag{7}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \Theta_k &= 2M\rho_0 R^5 \beta^2 \sin^2\left(\gamma - \frac{2\pi}{3}k\right) \left[1 - \frac{9}{14} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \beta \cos\left(\gamma - \frac{2\pi}{3}k\right)\right] \\
 &\quad + [a^4] \dots
 \end{aligned} \tag{8}$$

Die Trägheitsmomente sind bis Glieder in $a^4 \sim \beta^4$ entwickelt. Wird die invertierte Beziehung

$$a_{2\mu} = \frac{1}{\rho_0 R_0^5} \left\{ (-)^{\mu} I_{2-\mu} - \frac{1}{\rho_0 R_0^5} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\mu_1 \mu_2} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{pmatrix} I_{2\mu_1} I_{2\mu_2} \right\} \quad (9)$$

$$+ [a^3] \dots$$

in Θ_K eingesetzt, so lassen sich die Trägheitsmomente auf die erwähnte Form (1) bringen:

$$\Theta_z = \frac{(I_x - I_y)^2}{I_x + I_y} M + [a^4] \text{ analog } \Theta_x, \Theta_y \quad (10)$$

Anhang B

Vertauschungsrelationen des Drehimpulses

Der Drehimpuls eines Vielteilchensystems wird auf den Schwerpunkt bezogen (ohne Spin):

$$L_y = L_{x\beta} = \sum_{i,\alpha} (X_{i\alpha} - \bar{X}_\alpha) p_{i\beta} - (X_{i\beta} - \bar{X}_\beta) p_{i\alpha} \quad (11)$$

Er erfüllt im Laborsystem die Vertauschungsrelation

$$L_\alpha L_\beta - L_\beta L_\alpha = i\hbar L_\gamma \quad (12)$$

Bei einer kanonischen Transformation des Laborsystems auf ein körperfestes System, das um die Eulerschen Winkel ϑ_j gedreht ist, transformiert sich der Drehimpuls wie die Koordinaten

$$X'_{iA} = \sum_{\alpha} R_{A\alpha}(\vartheta_j) (X_{i\alpha} - \bar{X}_\alpha) \quad (13)$$

$$L_A = \sum_{\alpha} R_{A\alpha}(\vartheta_j) L_\alpha \quad (14)$$

bzw. wie ein Tensor

$$L_A = L_{BC} = \sum_{\alpha,\beta} R_{B\alpha} R_{C\beta} L_{\alpha\beta} \quad (15)$$

Der Drehimpulsoperator dreht das körperfeste System; er läßt sich daher als Differentialoperator in den Eulerschen Winkeln ausdrücken. Um L in Eulerschen Winkeln darzustellen, muß die folgende Beziehung (68) aus 2.3 invertiert werden

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vartheta_j} = \frac{1}{2} \sum_{A,B,\gamma} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial \vartheta_j} L_{AB} \quad (16)$$

Der Operator L hängt nach der Transformation (13) nur von den Eulerschen Winkeln ab und operiert nach (16) auf diese Koordinaten. Eine explizite Darstellung für L findet sich in Anhang D in Gl. (50). Da der Operator L nur auf die Eulerschen Winkel wirkt, können wir ihn mit Hilfe von (15) in der Form schreiben

$$L_c = \frac{\hbar}{i} \sum_{\alpha, i, j} (X'_{iA} R_{B\alpha} - X'_{iB} R_{A\alpha}) \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial X_{i\alpha}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{G}_j} \quad (17)$$

Wir erhalten somit nach Villars⁶ für die inverse Matrix von

$$\mathcal{M}_{j, AB} = R_{Bj} \frac{\partial R_{Aj}}{\partial \mathcal{G}_j} \quad (18)$$

den Ausdruck

$$\mathcal{M}_{AB, j}^{-1} = \sum_{i, \alpha} (X'_{iA} R_{B\alpha} - X'_{iB} R_{A\alpha}) \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial X_{i\alpha}} \quad (19)$$

$\mathcal{M}^{-1}$ hängt nach (18) nur von $\mathcal{G}_j$ ab. Man überzeugt sich mit Hilfe von Gl. (61) und (19) aus 2.3, daß gilt:

$$\begin{aligned} \sum_j \mathcal{M}_{AB, j}^{-1} \mathcal{M}_{j, BC} &= \sum_i (X'_{iA} R_{B\alpha} - X'_{iB} R_{A\alpha}) \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial X_{i\alpha}} \frac{\partial R_{Bj}}{\partial \mathcal{G}_j} R_{Cj} \\ &= \sum_i (X'_{iA} R_{B\alpha} - X'_{iB} R_{A\alpha}) \frac{(X'_{iB} R_{C\alpha} + X'_{iC} R_{B\alpha})}{I_B - I_C} = \delta_{AB, BC} \end{aligned}$$

L kommutiert nicht mit R ; aus $L_{AB} X'_{iC} = 0$ berechnet sich (ohne $\frac{\hbar}{i}$):

$$L_{AB} R_{Aj} = R_{Bj}, \quad L_{AB} R_{Bj} = -R_{Aj}, \quad L_{AB} R_{Cj} = 0 \quad (20)$$

und analoge Relationen.

Wir finden mit den letzten Gleichungen die bekannte Vertauschrelation^{6,12}:

$$L_A L_B - L_B L_A = -i\hbar L_C \quad (21)$$

Der Gesamtdrehimpuls eines Nukleonensystems setzt sich aus Bahn- und Spindrehimpuls zusammen und genügt im Laborsystem der Plus-Vertauschregel:

$$J_\alpha = L_\alpha + S_\alpha \quad \text{mit} \quad S_\alpha = \sum_i S_{i\alpha} \quad (22)$$

$$\text{und} \quad J_\alpha J_\beta - J_\beta J_\alpha = i\hbar J_\gamma \quad (23)$$

Wir beziehen nun die Spinanteile der Wellenfunktion nicht auf die Laborachsen, sondern auf die körperfesten Achsen. Dann bewirkt der Operator L_A , der ausschließlich auf Eulersche Winkel operiert, daß sämtliche intrinsische Nukleonenkoordinaten einschließlich der Spinanteile gedreht werden. L_A wandelt seine Bedeutung und wird zum Gesamtdrehimpuls.

$$L_A \Rightarrow J_A \quad \text{mit} \quad J_A J_B - J_B J_A = -i\hbar J_C \quad (24)$$

Der Bahndrehimpuls ist wie folgt zu ersetzen

$$\begin{aligned} \bar{L}_A &= J_A - S_A \\ \text{mit} \quad S_A &= R_A \alpha S_\alpha \end{aligned} \quad (25)$$

$\bar{L}_A$ und S_A kommutieren mit umgekehrten Vorzeichen

$$[S_A, S_B] = i\hbar S_C, \quad [\bar{L}_A, \bar{L}_B] = -i\hbar \bar{L}_C \quad . \quad (26)$$

Anhang C

C.1 Der Ausdruck $p_{iA} X'_{jC}$

Wir berechnen ausführlich die Relation $p_{iA} X'_{jC}$.
Mit

$$p_{iA} = R_{A\alpha} p_{i\alpha} = R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \quad \text{und} \quad X'_{jC} = R_{C\gamma} (X_{j\gamma} - \bar{X}_\gamma) \quad (27)$$

finden wir durch partielles Differenzieren:

$$R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} (R_{C\gamma} (X_{j\gamma} - \bar{X}_\gamma)) = \quad (28)$$

$$R_{A\alpha} R_{C\gamma} (\delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} - \frac{\partial \bar{X}_\gamma}{\partial X_{i\alpha}}) + (X_{j\gamma} - \bar{X}_\gamma) R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma}$$

Im einzelnen gilt:

a) Wegen $\bar{X}_\gamma = \frac{1}{N} \sum_i X_{i\gamma}$ folgt

$$\frac{\partial \bar{X}_\gamma}{\partial X_{i\alpha}} = \frac{1}{N} \delta_{\alpha\gamma} \quad (29)$$

b) $(X_{j\gamma} - \bar{X}_\gamma) R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} = X'_{jK} R_{A\alpha} R_{\gamma K}^{-1} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} \quad (30)$

für $K \neq C$: $R_{\gamma K}^{-1} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} = R_{K\gamma} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} = \frac{X'_{iC} R_{K\alpha} + X'_{iK} R_{C\alpha}}{I_C - I_K} \quad (31)$

nach Gleichung (79) aus 2.3.

für $K=C$: $R_{\gamma K}^{-1} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{C\gamma} R_{C\gamma} = 0 \quad (32)$

wegen

$$\sum_\gamma R_{A\gamma} R_{C\gamma} = \delta_{AC} \quad (33)$$

Fassen wir a) und b) zusammen, so ergibt sich mit (33):

$$P_{iA} X'_{jC} = \delta_{AC} \left(\delta_{ij} - \frac{1}{N} \right) + \sum_{K \neq C} \frac{\delta_{AK} X'_{iC} + \delta_{AC} X'_{iK}}{I_C - I_K} X'_{jK} \quad (34)$$

C.2 Berechnung einiger Operator-Relationen für die kinetische Energie.

Wir formen einige Ausdrücke im Operator der kinetischen Energie um; über doppelt auftretende Indices wird summiert.

$$1. \sum_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \frac{1}{N} P_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} P_\alpha \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} P_\alpha^2 \quad (35)$$

$$2. \sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{A\alpha} P'_{iA} = \sum_{i,\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{A\alpha} \right) P'_{iA} + R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} P'_{iA} \quad (36)$$

Im einzelnen gilt:

$$\begin{aligned} a) \sum_{i,\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{A\alpha} \right) P'_{iA} &= \frac{1}{2} \frac{R_{C\alpha} X'_{iD} + R_{D\alpha} X'_{iC}}{I_C - I_D} (L_{CD} R_{A\alpha}) P'_{iA} \\ &= \sum_{A \neq D} \frac{1}{I_A - I_D} X'_{iA} P'_{iA} \end{aligned} \quad (37)$$

Hierbei wurden folgende Beziehungen aus Anhang B, Gl.(20) verwendet:

$$L_C R_{AY} = R_{BY}, \quad L_C R_{BY} = -R_{AY}, \quad L_C R_{CY} = 0 \quad (38)$$

$$b) \sum_{i, \alpha} R_{A\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} p'_{iA} = p'_{iA}{}^2 + \frac{1}{2} R_{A\alpha} \frac{R_{C\alpha} X'_{iD} + R_{D\alpha} X'_{iC}}{I_C - I_D} (L'_{CD} - L'_{DC}) p'_{iA} \quad (39)$$

Wegen $X'_{iD} p'_{iC} + X'_{iC} p'_{iD} = 0$ und $LX' = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{R_{CA} X'_{iD} + R_{DA} X'_{iA}}{I_C - I_D} (L'_{CD} - L'_{DC}) p'_{iA} &= \left(L'_{AD} \frac{X'_{iD}}{I_A - I_D} \right) p'_{iA} \\ &= \sum_{A \neq D} \frac{2I_D}{(I_A - I_D)(I_A + I_D)} X'_{iA} p'_{iA} \end{aligned} \quad (40)$$

Somit

$$\sum_{i, \alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} R_{A\alpha} p'_{iA} = \sum_{i, A} p'_{iA}{}^2 + \sum_{i, A \neq D} \frac{I_A + 3I_D}{I_A^2 - I_D^2} X'_{iA} p'_{iA} \quad (41)$$

Der letzte Term kann mit Hilfe der Trägheitsmomente

$$\Theta_A = M \frac{(I_B - I_C)^2}{I_B + I_C}$$

auf eine symmetrische Form gebracht werden:

$$\sum_{i, A \neq D} \frac{I_A + 3I_D}{I_A^2 - I_D^2} X'_{iA} p'_{iA} = \frac{1}{2\Theta_A \Theta_B \Theta_C} \sum_{i, D} (p'_{iD} \Theta_A \Theta_B \Theta_C) p'_{iD} \quad (42)$$

$$3. \sum_{i, \alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \frac{1}{2} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} (L'_{AB} - L'_{BA}) =$$

$$\sum_{i, \alpha} \left(\frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \frac{1}{2} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} \right) (L'_{AB} - L'_{BA}) + \sum_{i, \alpha} \frac{1}{2} R_{B\gamma} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} (L'_{AB} - L'_{BA}) \quad (43)$$

$$\begin{aligned}
 \text{a) } \sum_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \left(R_{Bj} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} \right) &= \\
 \sum_{i\alpha} \left(R_{C\alpha} p'_{iC} + \frac{1}{2} R_{Dj} \frac{\partial R_{C\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} (L_{CD} - L'_{CD}) \right) \frac{R_{A\alpha} X'_{iB} + R_{B\alpha} X'_{iA}}{I_A - I_B} & \quad (44) \\
 &= 0,
 \end{aligned}$$

wie man durch partielles Differenzieren verifiziert.

$$\text{b) } \sum_{i\alpha} \frac{1}{2} R_{Bj} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} \cdot \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} (L_{AB} - L'_{AB}) = \sum_A \frac{(L_A - L'_A)^2}{\Theta_A / M} \quad (45)$$

mit $L_A = L_{BC}$ usw.

Es folgt:

$$\sum_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial X_{i\alpha}} \frac{1}{2} R_{Bj} \frac{\partial R_{A\gamma}}{\partial X_{i\alpha}} (L_{AB} - L'_{AB}) = \sum_A \frac{(L_A - L'_A)^2}{\Theta_A / M} \quad (46)$$

Anhang D

Die Definition spezieller Euler Winkel

Die Eulerschen Winkel (α, β, γ) sind gewöhnlich durch die drei folgenden Rotationen definiert ¹³:

1. Drehung um die raumfeste z-Achse um α
2. Drehung um die neue γ -Achse um β
3. Drehung um die körperfeste z-Achse um γ .

Für kleine Winkel entartet die Transformation und hängt nur von zwei Parametern ab: von β und der Summe $\alpha + \gamma$.

$$\begin{aligned} X' &= X + (\alpha + \gamma) Y - \beta Z \\ Y' &= Y - (\alpha + \gamma) X \\ Z' &= Z + \beta X \end{aligned} \quad (47)$$

Wegen dieser Singularität wählen wir eine andere Definition die für kleine Winkel dreiparametrig bleibt. Sie beschreibt kleine Drehungen symmetrisch in den Koordinatenachsen.

1. Drehung um die raumfeste z-Achse um φ
2. Drehung um die neue γ -Achse um ϑ
3. Drehung um die körperfeste X' -Achse um ψ .

Die beiden ersten Drehungen sind mit den gewöhnlichen identisch:

$$\varphi = \alpha, \quad \vartheta = \beta$$

Die körperfesten Koordinaten X', Y', Z' transformieren sich auf das raumfeste System wie folgt:

$$\begin{aligned} X' &= \cos \vartheta \cos \varphi X + \cos \vartheta \sin \varphi Y - \sin \vartheta Z \\ Y' &= (-\sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \sin \vartheta \sin \psi) X \\ &\quad + (\cos \varphi \cos \psi + \sin \varphi \sin \vartheta \sin \psi) Y + (\cos \vartheta \sin \psi) Z \\ Z' &= (\sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \sin \vartheta \cos \psi) X \\ &\quad + (-\cos \varphi \sin \psi + \sin \varphi \sin \vartheta \cos \psi) Y + \cos \vartheta \cos \psi Z \end{aligned} \quad (48)$$

In diesen Winkeln haben die Drehimpulsoperatoren die Form:

auf raumfeste Achsen bezogen:

$$\begin{aligned} L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_x &= \frac{\hbar}{i} (\cos \vartheta \operatorname{tg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{\cos \vartheta} \frac{\partial}{\partial \psi}) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} (\sin \varphi \operatorname{tg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\sin \varphi}{\cos \vartheta} \frac{\partial}{\partial \psi}) \end{aligned} \quad (49)$$

auf körperfeste Achsen bezogen:

$$\begin{aligned} L_{x'} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} \\ L_{y'} &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\sin \psi}{\cos \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos \psi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin \psi \operatorname{tg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \psi} \right) \\ L_{z'} &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\cos \psi}{\cos \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin \psi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \psi \operatorname{tg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \psi} \right) \end{aligned} \quad (50)$$

Man verifiziert mit diesen Ausdrücken leicht die in Anhang B gegebenen Vertauschrelationen.

Der Gesamtdrehimpuls schreibt sich

$$\begin{aligned} L^2 &= -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - \operatorname{tg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\cos^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2 \sin \vartheta}{\cos^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \psi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \end{aligned} \quad (51)$$

Für das Volumenelement der Transformation finden wir

$$d\Omega = |\cos \vartheta| d\varphi d\vartheta d\psi \quad (52)$$

Literaturverzeichnis

1. A. Bohr, Dan. Mat. Fys. Medd. 26 (1952) No. 14
A. Bohr und B.R. Mottelson, Dan.Mat.Fys. Medd.
27 (1953) No. 16
2. A. Faessler und W. Greiner, Z.Phys. 168 (1962) 425
A. Faessler und W. Greiner, Z.Phys. 170 (1962) 105
A. Faessler und W. Greiner, Z.Phys. 177 (1964) 190
A. Faessler, W. Greiner und R.K. Sheline, Nucl.Phys. 70
(1965) 33
3. D.L. Hill und J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
4. H.J. Lipkin, A.de Shalit, und I. Talmi, Nuovo Cimento 2
(1955) 773
T. Tamura, Nuovo Cimento 4 (1956) 713
R. Nataf, Nucl.Phys. 2 (1957) 497
5. H.J. Lipkin, in The Many Body Problem, John Wiley and
Sons, New York 1958, p. 335
6. F. Villars, Nucl.Phys. 3 (1957) 240
F. Villars, Annual Rev. of Nucl. Science 7 (1957) 185
7. J.P. Elliot und T.H. R. Skyrme, Proc.Roy.Soc. A 232
(1955) 561
S. Gartenhaus und C. Schwartz, Phys. Rev. 108 (1957) 482
I. Unna und I. Talmi, Phys.Rev. 112 (1958) 452
E. Baranger und C.W. Lee, Nucl.Phys. 22 (1961) 157
8. R.D. Woods und D.S. Saxon, Phys.Rev. 95 (1954) 577
9. S.G. Nilsson, Dan.Mat.Fys.Medd. 29 (1955) No.16
10. V.Gillet, Thesis, Universität Paris (1962)
11. B. Fink, Diplomarbeit, Universität Frankfurt (1967)
12. U. Mosel, Diplomarbeit, Universität Frankfurt (1967)
13. L. Biedenharn und P.J. Brussaard, Coulomb Excitation, p.2
Oxford Library of Phys.Science 19
14. A.R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics,
Princeton University Press 1957, 5
15. D.R. Inglis, Phys.Rev. 96 (1954) 1059
16. H.L. Acker, Dissertation, Universität Freiburg (1965)

Meinem Lehrer, Herrn Prof.Dr.W.Greiner, bin ich zu großem Dank verpflichtet. Insbesondere danke ich ihm für die Anregung zu dieser Arbeit, für sein starkes, aufmunterndes Interesse und für die zahlreichen, klärenden Diskussionen, die wesentlich zum Gelingen der Arbeit beitrugen.

Meinen Kollegen, namentlich Herrn B.Fink und Herrn U.Mosel sei gedankt für ihre stete Bereitschaft zu vielen anregenden Erörterungen.

Weiterhin danke ich dem Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt, das in großzügiger Weise Rechenzeit zur Verfügung stellte.

Für die freundliche Hilfe bei der Fertigstellung des Manuskripts danke ich Frau Löhlein und Frä. Springwald.

Lebenslauf

Am 28.6.1938 bin ich in Offenbach/Main geboren als Sohn des Diplom-Händelslehrers Dr. Heinrich Scheid und seiner Ehefrau Rosa geb. Müller. Nach der Umsiedlung von Offenbach nach Bensheim/Bergstraße im Jahre 1943 besuchte ich hier ab Herbst 1944 die Volksschule und anschließend ab Ostern 1949 das Alte Kurfürstliche Gymnasium Bensheim, an dem ich im Frühjahr 1958 die Reifeprüfung bestand. Im Sommerhalbjahr 1958 arbeitete ich als Praktikant in der Motorenfabrik Darmstadt und begann mit dem Wintersemester 1958/59 das Studium der Physik an der Technischen Hochschule in Darmstadt, das ich im Dezember 1964 mit der Diplomprüfung abschloß. Meine Diplom-Arbeit, die ein kernphysikalisches Thema behandelte, fertigte ich unter Leitung von Prof. Scherzer im Institut für theoretische Physik der Technischen Hochschule Darmstadt an. Am gleichen Institut hatte ich danach von Febr. 1965 bis Jan. 1967 die Verwaltung einer wissenschaftlichen Assistentenstelle inne. Seit Februar 1967 bin ich bei Prof. Greiner am Institut für theoretische Physik der Universität Frankfurt angestellt.

